

Ecole doctorale: Physique en Ile de France

Laboratoire de Physique des Plasmas Lasers

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives

(Centre DAM Ile de France)

Doctorat

(Spécialité: Physique théorique)

Benjamin-Edouard Peigney

**Contribution à l'analyse de problèmes
multi-échelles :
application à des processus de diffusion et de
combustion**

Thèse co-dirigée par Prof. J.Garnier (Paris 7) et Prof. V. Tikonchuk (Bordeaux I)

Soutenue publiquement le 9 Février 2015

Composition du jury

<i>Président :</i>	Prof. Patrick Mora
<i>Directeurs :</i>	Prof. Josselin Garnier Prof. Vladimir Tikhonchuk
<i>Rapporteurs :</i>	Prof. Thierry Goudon Prof. Jean-Pierre Matte
<i>Examineurs :</i>	Prof. Xavier Blanc Dr. Jean-François Clouët

Remerciements

"Il faut se tenir au difficile, tout ce qui vit s'y tient".

Cette maxime du poète Rilke illustre assez bien ce qui m'a poussé à me lancer dans ce travail de thèse, entrepris après avoir travaillé quelques années sur des thématiques plus appliquées au sein du Commissariat à l'Energie Atomique. Par ce choix, j'ai en effet cherché à développer, avec sincérité et rigueur, un questionnement de fond sur des problématiques complexes, en lien avec les systèmes multi-échelles rencontrés en physique des plasmas de fusion.

Le chemin emprunté était loin d'être le plus tranquille ou le plus direct.

La route n'était pas tracée par avance : le parcours s'est révélé par moments bien tortueux, parsemé d'embûches, et je me suis retrouvé quelque fois presque perdu. Il a même fallu parfois lutter contre des vents soufflant dans un sens opposé, sous la forme d'un scepticisme ambiant ou d'une certaine ironie, ce qui n'a pas non plus aidé. Il s'agissait ainsi de suivre un périple difficile, d'endurance et solitaire, auquel peu de gens croyaient au départ. Fort heureusement, l'étonnement, l'envie d'apprendre, de comprendre et de découvrir ne m'ont pas lâché.

Plus modestement, je dois ce travail de longue haleine aux personnes avec lesquelles j'ai eu la chance de pouvoir collaborer. Ce voyage dans le monde du multi-échelle fut en effet l'occasion de travailler avec des chercheurs de renom issus de différentes communautés scientifiques. Je ne pourrais ni réduire, ni figer la richesse de ces grandes âmes dans quelques lignes de remerciements.

La profondeur des êtres est par nature insaisissable et je devrais peut-être laisser les choses en silence. Toutes les personnes avec qui j'ai eu la chance de collaborer savent déjà tout le bien que je pense d'elles, et à quel point j'ai été honoré de travailler avec leur aide sur des sujets riches et porteurs, à la croisée entre plusieurs disciplines.

Néanmoins, je m'en voudrais de ne pas écrire noir sur blanc leur nom, ne serait ce que pour leur adresser mon plus profond respect et toute ma gratitude. Ces personnes, aux qualités humaines et intellectuelles rares, resteront gravées dans mon esprit à jamais. Je leur suis infiniment reconnaissant pour tout ce qu'elles m'ont permis d'apprendre et de découvrir.

Je suis tout d'abord heureux de remercier mes directeurs de thèse, Josselin Garnier et Vladimir Tikhonchuk, pour la confiance qu'ils m'ont accordée au début de la thèse, amorcée dans une situation quelque peu délicate. Leur bureau est toujours resté grand ouvert pour m'aider à mener à bien mon projet de recherche. Leurs conseils généraux, leurs encouragements, la relecture attentive de mes articles et de mon manuscrit se sont révélés être précieux tout au long du parcours.

En outre, j'ai eu la chance de pouvoir travailler avec Xavier Blanc. Ce fut un réel honneur de publier avec un tel mathématicien. J'ai beaucoup appris à ses côtés, en particulier sur la manière d'aborder un problème multi-échelle. Il ne sait sans doute pas à quel point j'ai été touché par sa main tendue, son écoute et sa générosité. Je le remercie du fond du cœur pour avoir cru en moi dès le début.

Je remercie aussi chaleureusement mon collègue Olivier Larroche, qui a toujours pris

le temps de répondre à mes questions avec une disponibilité sans faille. Ses conseils désintéressés furent des atouts de valeur pour mener à bien le développement d'un code numérique complexe et novateur. J'ai également eu plaisir à partager avec lui une certaine intuition physique des problèmes. Là encore, la collaboration fut très enrichissante, et je lui en suis fort gré.

Je tiens à saluer en tant que collaborateur mon frère Michaël, qui m'a fait découvrir la Science quand j'étais petit et que j'ai eu la chance de retrouver un peu par hasard dans l'univers des systèmes multi-échelles. Les "sessions Mines" furent ainsi un moyen dérobé pour travailler soigneusement sur les problématiques de bornes de milieux hétérogènes en régime non-linéaire, offrant une perspective prometteuse et complémentaire à mon travail de thèse.

Je remercie Thierry Goudon et Jean-Pierre Matte pour avoir accepté la lourde tâche de rapporter mes travaux de thèse. Leurs conseils et leurs remarques m'ont aidé à améliorer la clarté et la précision du manuscrit. J.P Matte me fait également l'honneur d'être venu spécialement du Québec pour assister à la soutenance.

Merci à Patrick Mora pour avoir examiné mon travail et présidé le jury de la soutenance.

Merci également à mes supérieurs du CEA, en particulier F. Olive, J.F Clouët, qui me fait le plaisir de participer à mon jury en tant qu'examineur, et E. Lefebvre pour m'avoir accordé une certaine liberté sans laquelle je n'aurais pas pu concrétiser mon entreprise.

Il m'importe de remercier Philippe et Philippe. Le premier pour m'avoir mis le pied dans l'étrier dans le monde du travail, tout en me permettant bien de rester fidèle à moi même. Le second pour ses bons petits plats, ses gestes pleins d'attention et de délicatesse.

Je remercie mes collègues de proximité, Franck, pour les petits pains du midi et les discussions musique, Guillaume, pour les échanges que l'on a pu avoir autour d'un thé et d'un petit gâteau, sur la richesse de python et les perspectives du machine learning. Merci à mes ami(e)s, Anna, Erica, Caro, Fab, Frederic, Tibz et Roland pour leur soutien, leur complicité, et leur réconfort.

Merci à mes amis "zikos", Sève, Nafolos, Greg, Pierre et tous les autres musiciens avec qui j'ai eu le plaisir de pouvoir jouer. J'espère que l'aventure reprendra vite de plus belle. En tous cas, les liens humains resteront.

Merci à ma famille, mes parents, Béatrice et Jack, à Tata Kiki, à Cathy et au petit James, pour m'avoir soutenu à distance et m'avoir aidé dans la préparation du pot.

Je ne peux conclure sans me tourner vers la petite fée Vivi, qui m'a accompagné dans ma quête avec patience et bienveillance, en chassant d'un battement d'ailes les esprits malins qui auraient pu s'approcher d'un peu trop près. Bien au delà du projet qui n'aurait sans doute pas abouti sans elle, je pense à tous ces moments de douceur partagée, de tendresse et de poésie.

To my beloved one,

Un voyage de mille lieues commence toujours par un premier pas, Lao-tseu, Tao Te King,

Sommaire

Introduction générale	xiii
-----------------------	------

Partie I Homogénéisation d'un processus de diffusion en milieu fissuré	13
---	-----------

Introduction de la première partie	19
------------------------------------	----

Chapitre 1	
Techniques d'homogénéisation	

1.1	Introduction	23
1.2	Problème considéré	24
1.3	Propriétés du problème elliptique	25
1.3.1	Cas général	25
1.3.2	Cas périodique	27
1.4	Le développement à deux échelles	27
1.5	Structure du modèle homogénéisé	31
1.6	Notion de correcteurs	33

Chapitre 2	
Cas de la diffusion en milieu fissuré : formulation du modèle homogénéisé	

2.1	Introduction	35
2.2	Présentation du problème et motivation	36
2.2.1	Géométrie	36
2.2.2	Conditions limites	36
2.2.3	Motivation	36
2.2.4	Problèmes similaires en homogénéisation	37
2.3	Formulation du problème exact	39
2.4	Développement asymptotique à deux échelles	39
2.5	Analyse de la couche limite en pointe de fissure	41
2.6	Equation limite homogénéisée	45
2.7	Analyse du problème homogénéisé	47

Chapitre 3	
Preuve de la convergence vers le modèle homogénéisé MOSAIC	

3.1	Introduction	51
-----	------------------------	----

3.2	Enoncé de la proposition et remarques préliminaires	53
3.3	Lemmes techniques préliminaires	53
3.3.1	Une première estimation	54
3.3.2	Convergence faible dans $L^2(\Omega)$	54
3.3.3	Estimation du terme de bord sur $\Gamma_\varepsilon^\alpha$	56
3.3.4	Convergence sur les bords Γ^1 et Γ^0	57
3.3.5	Convergence sur le bord Γ^β	59
3.4	Preuve de convergence	61

Chapitre 4 Illustration numérique du modèle MOSAIC

4.1	Introduction	71
4.2	Calculs directs sur le domaine fissuré	72
4.3	Formulation faible du modèle homogénéisé	73
4.4	Résolution numérique par point fixe	75
4.5	Synthèse des approches numériques pour la résolution du modèle MOSAIC .	75

Chapitre 5 Extensions à des configurations fissurées aléatoires
--

5.1	Géométrie aléatoire	80
5.1.1	Problème exact	80
5.2	Changement d'échelle	81
5.2.1	Développement asymptotique	81
5.3	Formulation du problème homogénéisé	83
5.4	Structure multi-échelle du problème final	83
5.5	Illustration numérique	84

Chapitre 6 Bornes sur la conductivité effective de milieux hétérogènes non-linéaires

6.1	Motivations	87
6.2	Homogénéisation stochastique en régime linéaire	91
6.2.1	G -convergence	92
6.2.2	H -convergence	93
6.2.3	Bornes optimales	93
6.3	Régimes non-linéaires	95
6.3.1	Approche par immersion sur l'énergie effective	96
6.3.2	Application de la méthode de translation sur l'énergie	98
6.3.3	Choix du potentiel de comparaison quasi-convexe	99
6.3.4	Stratégie pour la recherche de nouvelles bornes	100
6.3.5	Mise en œuvre numérique	104
6.3.6	Illustrations numériques pour le calcul de la borne inférieure	104

Conclusion de la première partie

Bibliographie	111
---------------	-----

Partie II Approche multi-échelle en cinétique ionique - Application au transport de particules suprathermiques dans les plasmas de fusion	115
--	------------

Introduction de la deuxième partie

Chapitre 1
Echelles caractéristiques d'un plasma

1.1	Paramètre de couplage	121
1.2	Ecrantage et longueur de Debye	123
1.3	Echelle de temps	123
1.4	Echelle de vitesse	124

Chapitre 2
Réduction statistique et équation de Vlasov-Fokker-Planck

2.1	Description complète du problème à N corps - équation de Liouville	126
2.1.1	Fonction de distribution à N particules	126
2.1.2	Réduction statistique	127
2.1.3	Application aux plasmas cinétiques	130
2.2	Modélisation des collisions Coulombiennes	131
2.2.1	Calcul de la déviation angulaire	132
2.2.2	Section efficace différentielle	133
2.2.3	Prédominance des petites déviations - notion de logarithme Coulombien	134
2.3	Equation de Fokker Planck	137
2.3.1	Développement limité	137
2.3.2	Retour sur le cas Coulombien	139
2.3.3	Formulation différentielle : notion de potentiels de Rosenbluth . . .	143
2.3.4	Formulation intégrale de Landau	144
2.4	Propriétés de l'opérateur de Fokker-Planck et réduction fluide	145
2.4.1	Définition de l'état d'équilibre	145
2.4.2	Propriétés générales de l'opérateur de collision	146
2.4.3	Moments hydrodynamiques	147
2.4.4	Equations fluides	148

Chapitre 3
Modèle hybride fluide-cinétique pour la Fusion par Confinement Inertiel

3.1	Principes de la Fusion par Confinement Inertiel	152
3.2	Pertinence de l'approche cinétique	154
3.3	Modélisation cinétique du combustible DT d'une cible FCI	155
3.4	Réduction du modèle cinétique par développement asymptotique	157
3.4.1	Normalisation de la fonction de distribution électronique	158

3.4.2	Renormalisation des termes de collision	159
3.4.3	Forme de la distribution électronique	159
3.4.4	Développements asymptotiques de potentiels de Rosenbluth ioniques	160
3.4.5	Collisions des électrons sur les ions	161
3.4.6	Collisions des ions sur les électrons	162
3.4.7	Equation électronique	163
3.4.8	Conductivité électronique	165
3.4.9	Equation du champ électrique	165
3.5	Choix d'un système d'unités réduites	166
3.6	Modèle complet adimensionné	166

Chapitre 4

Approche cinétique à deux échelles de vitesse pour les plasmas de fusion en FCI

4.1	Introduction et motivation de l'étude	169
4.2	Nécessité d'une approche cinétique pour les particules suprathermiques . .	170
4.3	Equation de Vlasov-Fokker-Planck pour les particules α	172
4.4	Importance relative de l'effet des ions et des électrons sur le ralentissement des particules α	172
4.5	Description multi-échelle de la fonction de distribution des particules α . .	173
4.5.1	Discussion physique	173
4.5.2	Décomposition multi-échelle de l'opérateur de Fokker-Planck . . .	175
4.5.3	Analyse de la partie diffusion de l'opérateur de Fokker-Planck . . .	178

Chapitre 5

Analyse asymptotique de l'opérateur de Fokker-Planck à deux échelles d'énergie

5.1	Motivation	181
5.2	Problème modèle	182
5.3	Mise à l'échelle des fonctions de distribution thermiques	183
5.4	Equation limite à l'échelle suprathermique	185
5.5	Equation limite à l'échelle thermique	187
5.5.1	Mise à l'échelle en vitesse	187
5.5.2	Changement d'échelle temporelle	188
5.6	Condition de couplage multi-échelle	188
5.7	Lien avec la stratégie numérique	189

Chapitre 6

Mise en œuvre numérique : le code cinétique FUSE

6.1	Introduction	192
6.2	Co-existence de deux maillages en vitesse	192
6.3	Collisions à l'échelle thermique	194
6.3.1	Principe de la méthode numérique	194
6.3.2	Développement multipolaire des potentiels de Rosenbluth	196

6.3.3	Discrétisation conservative de l'opérateur de Fokker-Planck	198
6.3.4	Traitement de la non-linéarité - méthode ADI	199
6.3.5	Potentiels de Rosenbluth électroniques	202
6.3.6	Calcul des potentiels de Rosenbluth résiduels : équation de Poisson	202
6.3.7	Optimisation du schéma numérique des collisions à l'échelle thermique	203
6.4	Advection de la composante thermique	204
6.4.1	Réalisation de l'advection en coordonnées sphériques	205
6.4.2	Implémentation numérique	206
6.4.3	Conditions initiale et aux limites pour l'advection	207
6.5	Accélération de la composante thermique	207
6.6	Choix du maillage	208
6.6.1	Maillage spatial	208
6.6.2	Maillage en vitesse pour la grille thermique	209
6.6.3	Adaptation dynamique du maillage en vitesse	210
6.7	Collisions à l'échelle suprathermique	210
6.7.1	Discrétisation de l'opérateur de Fokker-Planck	211
6.7.2	L'algorithme LSE (Locally Sub-cycled Explicit)	213
6.8	Advection de la composante suprathermique	217
6.9	Accélération de la composante suprathermique	220
6.10	Couplage multi-échelle thermique-suprathermique	220
6.10.1	Du point de vue des particules rapides	220
6.10.2	Du point de vue de la composante thermique	221
6.11	Traitement des électrons	223
6.11.1	Convection des électrons	223
6.11.2	Travail des forces de pression et des forces électriques	223
6.11.3	Conduction thermique électronique	224
6.11.4	Autres mécanismes	225
6.12	Synthèse des algorithmes du code cinétique FUSE	225
6.13	Complexité algorithmique du code FUSE	226
6.14	Validation du code FUSE sur quelques problèmes test de type FCI	228
6.14.1	Ralentissement isotrope	228
6.14.2	Relaxation anisotrope et instationnaire	229
6.14.3	Conservation de l'énergie et répartition du dépôt	231

Chapitre 7

Analyse de l'implosion et de la combustion de cibles FCI au niveau cinétique

7.1	Introduction et motivation	237
7.2	Originalité de l'approche cinétique proposée	238
7.3	Configuration de cible étudiée	239
7.4	Pertinence de l'approche cinétique ionique multi-échelle	241
7.5	Performances intégrées du combustible DT	242
7.5.1	Puissance thermonucléaire et masse surfacique	242
7.5.2	Conditions thermodynamiques centrales	243

SOMMAIRE

7.5.3	Sensibilité du calcul cinétique à la masse de l'ablateur	244
7.6	Effets cinétiques durant la phase d'implosion	245
7.7	Effets cinétiques pendant la phase de combustion	253
7.7.1	Mise en évidence d'un précurseur cinétique	253
7.7.2	Structure de la flamme de combustion	257
7.7.3	Perturbation cinétique des flux de chaleur ioniques	258
7.8	Le processus de combustion au niveau cinétique	259
7.9	Synthèse et perspectives	263

Conclusion générale	267
----------------------------	------------

Annexes

Annexe A
Calcul de la partie explicite des fonctions de distribution thermiques

Annexe B
Discretisation des termes de Fokker-Planck pour la composante thermique

Annexe C
Extensions de l'approche multi-échelle du couplage thermique/suprathermique

C.1	Prise en compte des collisions à grand angle	281
C.1.1	Motivation	281
C.1.2	Notations	281
C.1.3	Forme générale du terme de Boltzmann	282
C.1.4	Simplification pour une cible thermique	283
C.2	Traitement hybride fluide/cinétique des espèces ioniques	287

Bibliographie	289
----------------------	------------

Introduction générale

Un système physique est dit multi-échelle, lorsqu'il contient en son sein des variables de temps ou d'espace évoluant sur des échelles très différentes. Il est alors nécessaire de développer des techniques particulières - dites multi-échelles - pour modéliser et simuler numériquement le couplage des échelles influant sur le comportement macroscopique du système.

Le caractère multi-échelle d'un problème peut être de différentes natures. Tout d'abord, un système peut être multi-échelle en *espace*. C'est par exemple le cas des matériaux composites caractérisés par l'existence d'une structure microscopique complexe (mais largement plus grandes que l'échelle atomique) conférant à la structure des propriétés macroscopiques particulières (résistance, légèreté, mémoire de forme...). Dans les problèmes impliquant des milieux composites (ou plus généralement hétérogènes), plusieurs échelles spatiales doivent être traitées simultanément et la simulation directe de tels milieux est souvent hors de portée. Une approche possible est alors de décrire le comportement *effectif* du milieu à partir de la connaissance (souvent partielle) de la micro-structure. Le terme "effectif" est relié à l'échelle macroscopique d'observation. Cette échelle correspond en général à l'échelle d'intérêt du problème considéré, reliée par exemple à des grandeurs moyennes mesurées expérimentalement. Le détail de la micro-structure n'a d'ailleurs pas vraiment d'intérêt en soi : on cherche plutôt à caractériser la manière dont le comportement d'ensemble de la structure est affecté par des modifications de la micro-structure. En outre, la caractérisation de la micro-structure sous-jacente s'effectue au moyen de fonctions de corrélation à n -points qui offrent une description statistique du milieu multi-échelle. En général, la description complète requiert un ensemble infini de fonctions de corrélation. Cet ensemble n'est en pratique pas accessible et il est nécessaire d'avoir recours à des approximations pour estimer le comportement effectif.

De telles problématiques multi-échelles en espace se retrouvent dans de nombreux domaines industriels, comme par exemple dans l'ingénierie pétrolière. L'industrie pétrolière est amenée aujourd'hui à extraire du pétrole dans des sous-sols très difficiles d'accès, constitués de réservoirs formés d'une roche poreuse et contenant de nombreuses fissures microscopiques. Une méthode d'extraction est d'injecter de l'eau à des endroits stratégiques pour faire jaillir le pétrole. On cherche à optimiser la commande d'injection d'eau pour maximiser la quantité de pétrole extraite. Ce problème de commande optimale repose sur la simulation numérique des effets d'advection et de diffusion au sein du milieu fissuré. La complexité du sous-sol est telle qu'une approche directe est hors de portée.

Des difficultés semblables se retrouvent également dans la problématique du stockage souterrain des déchets nucléaires, pour laquelle on cherche à modéliser l'écoulement de fluide dans un sous-sol poreux.

Dans de telles situations multi-échelles, il est nécessaire d'aborder le problème de façon moyenne. La théorie de l'*homogénéisation* fournit des outils permettant de moyenner rigoureusement les informations relatives à l'échelle microscopique, afin de déduire une équation gouvernant l'échelle macroscopique du problème multi-échelle considéré.

Les théorèmes de l'homogénéisation s'appliquent plus facilement dans le cas où le milieu multi-échelle est périodique. Une première approche pratique d'un problème multi-échelle peut ainsi être de supposer une certaine périodicité dans la micro-structure (même si cette dernière n'est pas rigoureusement périodique). L'homogénéisation fournit alors des règles de construction explicites permettant d'établir un modèle moyen régissant l'échelle

macroscopique et où l'échelle microscopique n'apparaît plus directement.

L'extension à des configurations aléatoires, c'est à dire à des milieux mal connus, est possible mais est en général beaucoup plus délicate. Dans de telles situations, qui sont en fait les plus fréquentes dans les problèmes industriels, le matériau est bel et bien déterministe, mais on n'en a pas une connaissance suffisante pour connaître les propriétés du milieu en chaque point. On ne peut que probabiliser les variables que l'on ne sait pas caractériser de manière exacte. Dans ce contexte, on ne dispose souvent plus des règles de construction explicites du cas périodique. Une voie possible est alors de développer des *bornes* rigoureuses sur la loi de comportement effective du milieu (ou sur son énergie effective), à partir d'une description statistique incomplète de la micro-structure. On cherche à établir des bornes optimales, qui deviennent plus sélectives lorsqu'une information supplémentaire sur la micro-structure est prise en compte. Ces bornes peuvent alors être considérées comme de bonnes estimations du comportement effectif.

D'un point de vue numérique, l'approche directe d'un problème multi-échelle consistant à discrétiser le domaine spatial avec un pas de résolution très fin n'est en général pas ce que l'on recherche. Tout d'abord, cette approche peut ne pas être possible, en raison de la méconnaissance de la micro-structure, décrite de manière stochastique. Il s'agit alors d'exploiter au mieux les informations disponibles sur la statistique des hétérogénéités pour proposer une modélisation moyenne macroscopique représentative. En outre, même si l'on connaît la micro-structure de façon déterministe, on ne dispose pas nécessairement de la puissance de calcul pour résoudre les petites échelles sur l'ensemble du domaine macroscopique. Il faut alors chercher à mieux répartir l'effort de calcul disponible afin d'en sortir une approximation représentative et contrôlée de la solution réelle. Remarquons en effet qu'appliquer une approche directe d'un problème multi-échelle avec un pas de maillage inadapté à la résolution de l'échelle microscopique conduit en général à une solution numérique fautive, pouvant dévier de la solution physique de manière non maîtrisée.

En outre, un système physique peut présenter plusieurs échelles d'*énergie* (ou de manière équivalente, plusieurs échelles de *temps*).

Par exemple, en dynamique des fluides, les écoulements turbulents sont caractérisés par une cascade d'échelles d'énergie, évoquées de façon particulièrement parlante et esthétique dans l'estampe japonaise du peintre Hokusai "Sous la vague au large de Kanagawa" (Fig.1). Dans cette illustration, on voit déjà apparaître l'intuition que le comportement d'ensemble de la vague est intimement lié à celui des structures tourbillonnaires plus petites, de sorte que la dynamique des échelles microscopiques pilote la propagation macroscopique de la vague. En dessous de l'échelle de tourbillons la plus petite, dite échelle de Kolmogorov, la viscosité domine et l'énergie cinétique des tourbillons se dissipe en chaleur.

Le cas des milieux plasmas (que l'on peut définir comme étant des gaz ionisés) constitue un exemple de système multi-échelle particulièrement riche où coexistent des populations de particules chargées caractérisées par des échelles d'énergie (et de temps) très contrastées. Les particules plus lourdes réagissent suivant des temps de réponse plus longs, tandis que les particules plus légères, comme les électrons, évoluent presque instantanément.

Signalons que les plasmas sont souvent considérés comme un quatrième état de la



FIGURE 1 – "Sous la vague au large de Kanagawa", d'Hokusai
La dynamique macroscopique de la vague est pilotée par une hiérarchie d'échelles correspondant à différents niveaux de structures tourbillonnaires.

matière, en fait le plus répandu dans l'Univers, les étoiles étant principalement des milieux plasmas.

L'originalité des plasmas tient au fait que ces systèmes couplés présentent à la fois les propriétés fluides d'un gaz (phénomènes de mélanges, d'instabilités voire de turbulence) et les propriétés conductrices des métaux. Les plasmas sont en effet caractérisés par un nombre important de porteurs de charges en mouvement et en interaction, ce qui leur confère un caractère diélectrique bien particulier, notamment lorsqu'ils sont soumis à un champ électromagnétique externe.

Pour modéliser les milieux plasmas, on doit disposer d'un formalisme adapté afin de représenter à un instant donné l'ensemble des interactions électriques et magnétiques entre toutes les particules chargées du système. Là encore, la dynamique microscopique de chaque particule individuelle n'a pas réellement d'intérêt physique en soi et est inaccessible à la fois au calcul et à l'expérience. Compte tenu du grand nombre de particules chargées à traiter (de l'ordre du nombre d'Avogadro), cela générerait un volume de données totalement prohibitif et non pertinent par rapport aux observables moyennes expérimentales. Il est alors nécessaire d'aborder le problème de façon *statistique* en moyennant les corrélations microscopiques. Ceci permet alors de déduire un modèle d'évolution adapté à l'échelle macroscopique. Le modèle moyen peut alors être résolu (souvent numériquement) sur des temps et des domaines spatiaux relativement grands.

La question de la modélisation de tels systèmes multi-échelles se pose par exemple en physique de la fusion nucléaire, qui est une source d'énergie prometteuse pour les futures centrales nucléaires. Dans les problématiques de Fusion par Confinement Inertiel (FCI), que nous détaillerons dans la seconde partie du présent manuscrit, on cherche à simuler les plasmas réactionnels formés d'hydrogène (sous la forme de deutérium D

et de tritium T) sur des échelles de temps et d'espace macroscopiques, correspondant à l'échelle hydrodynamique. L'échelle d'intérêt est en particulier largement supérieure à l'échelle électronique. Les électrons réagissent en effet suivant une dynamique très rapide (quasi-instantanée à l'échelle d'observation ionique) du fait de leur faible masse ($m_e/m_i \sim 1/1836$). Les populations ioniques peuvent aussi évoluer sur plusieurs échelles d'énergie : on peut par exemple avoir un couplage entre des particules rapides (correspondant à des produits de réactions de fusion), évoluant sur une plage d'énergie étendue (échelle d'énergie \sim MeV), avec des ions caractérisés par un domaine en énergie beaucoup plus localisé (échelle d'énergie \sim keV). Le problème présente ainsi un caractère multi-échelle marqué, pour lequel il est nécessaire de développer des méthodes spécifiques de résolution afin d'envisager une simulation numérique qui puisse s'effectuer en des temps calculs raisonnables.

De manière schématique, on peut aborder un problème multi-échelle suivant deux stratégies :

- On peut choisir de traiter *conjointement* mais de façons différentes les petites et les grandes échelles. On cherche alors à développer une modélisation adaptée pour décrire l'évolution de chaque échelle et à établir la loi de *couplage* entre les différents modèles correspondant à chaque niveau de description.
- On peut également avoir recours à une technique d'*homogénéisation* de manière à absorber l'effet des petites échelles dans un modèle effectif évoluant au niveau macroscopique. Le modèle ainsi homogénéisé peut alors être résolu numériquement par les techniques numériques usuelles. Le maillage de la discrétisation correspondant n'a en particulier plus besoin d'être adapté à l'échelle microscopique qui a été moyennée dans l'équation régissant l'échelle macroscopique. La solution du modèle homogénéisé ainsi obtenue est alors une bonne approximation (en un sens que l'on précisera) de la solution exacte du problème.

De manière générale, la nature du problème physique, la complexité du modèle et la valeur du contraste des deux échelles dictent le choix de l'approche.

Les résultats établis durant ce travail de thèse concernent la résolution de deux problèmes multi-échelles, pour lesquels nous mettons en place - en les justifiant aussi rigoureusement que possible - des techniques de résolution en vue de répondre à une problématique physique particulière.

- Le premier problème multi-échelle traité est celui de la diffusion de la chaleur dans un milieu fissuré, où coexistent deux échelles spatiales. Les fissures correspondent à des hétérogénéités décrites à l'échelle microscopique. Nous appliquons alors une approche de type homogénéisation afin de moyennner l'effet des fissures microscopiques sur le phénomène de diffusion modélisé à l'échelle macroscopique.
- Le second problème multi-échelle abordé traite des plasmas de fusion étudiés dans le contexte de la FCI. On établit une modélisation détaillée au niveau cinétique du processus de combustion de l'hydrogène (initialement sous la forme d'une capsule sphérique cryogénique formée de deutérium D et de tritium T) réagissant suivant la réaction de fusion $D + T \rightarrow \alpha + n + 17.56 \text{ MeV}$. L'aspect multi-échelle du problème est ici lié à la coexistence de deux échelles d'énergie nécessaires pour décrire les populations ioniques à traiter : les ions dits thermiques D,T, sont caractérisés par

une énergie de l'ordre du keV tandis que les particules α suprathermiques, créées à 3.52 MeV par les réactions de fusion évoluent sur une gamme d'énergie beaucoup plus étendue. La technique multi-échelle développée pour ce problème consiste à traiter conjointement les deux échelles d'énergie, et à introduire un couplage dont la forme est dictée par la structure du modèle théorique sous-jacent, de type Vlasov-Fokker-Planck.

Le présent manuscrit s'organise autour de ces deux problèmes multi-échelles, que nous présentons dans deux parties distinctes.

La première partie est consacrée au problème d'homogénéisation de processus de diffusion en milieux fissurés.

Au premier chapitre, nous rappelons certains résultats relatifs à la théorie de l'homogénéisation en milieu périodique, applicable à des problèmes physiques présentant des similarités par rapport au problème de diffusion étudié. Nous reprenons en particulier le problème de la conductivité linéaire dans un milieu composite périodique. Nous introduisons la méthode du développement asymptotique permettant de déduire la forme du modèle homogénéisé. La structure du problème final obtenu par homogénéisation est alors analysée : on montre comment l'échelle microscopique est représentée au niveau du modèle homogénéisé régissant l'échelle macroscopique du problème.

Dans le second chapitre, ces techniques d'homogénéisation sont alors appliquées à un problème particulier impliquant l'équation de la chaleur dans un milieu périodique fissuré. On montre de façon précise que l'effet des fissures se traduit par un *terme source* volumique dans l'équation de la chaleur écrite sur la matériau homogénéisé, c'est à dire ne contenant plus la description directe des fissures. Plus précisément, tout se passe au niveau macroscopique comme si une partie du flux incident était redistribuée sous la forme d'un terme source en volume dans le matériau homogénéisé. Cette phénoménologie, intuitive et démontrée rigoureusement par l'analyse mathématique du problème multi-échelle, justifie l'appellation du modèle homogénéisé dit MOSAIC, qui est un acronyme pour *Model Of Sinks Averaging Inhomogeneous behavior of Cracked media*. Ensuite, la structure du modèle homogénéisé MOSAIC est analysée : celui-ci s'écrit selon deux sous-problèmes aux limites définis respectivement sur la partie fissurée et intègre du matériau. Chacun de ces deux sous problèmes est bien posé. Pour revenir au problème complet, défini sur l'intégralité du matériau homogénéisé, il est alors nécessaire de considérer des conditions de transmission sur la valeur de la solution et de son flux à l'interface connectant la partie fissurée et la zone intègre du matériau. On montre que ces conditions de transmission sont en fait liées à l'existence d'une couche limite au voisinage du bord de la fissure. L'effet de la couche limite est ensuite étudié rigoureusement par analyse asymptotique. On définit une mise à l'échelle de la variable d'espace variant dans la direction de l'axe des fissures, en "zoomant" autour de la position de l'interface connectant la zone fissurée et la zone intègre. On montre finalement que le modèle MOSAIC admet bien une unique solution. Pour cela, on met en place une approche par point fixe, consistant à résoudre de manière itérative les deux sous-problèmes aux limites, connectés par les conditions de transmission. Ceci donne au passage une méthode de construction de la solution homogénéisée que l'on exploitera à des fins numériques [P1].

Au chapitre 3, on montre que le modèle MOSAIC obtenu en raisonnant de manière nécessaire à partir du développement asymptotique est bien la limite, en un sens que l'on précise, du modèle exact lorsque la période du milieu fissuré ε tend vers 0. La preuve de convergence s'appuie sur la construction de sommes de Riemann adaptées à la forme particulière des fissures. On utilise la convergence faible dans L^2 de suites de fonctions particulières pour passer à la limite dans les intégrales. On peut alors identifier le problème obtenu à la limite $\varepsilon \rightarrow 0$ avec le modèle MOSAIC établi dans le chapitre 2. Les conditions de transmission au bord de la fissure, qui sont en fait étroitement liées à la forme particulière de la fissure, sont également retrouvées de manière rigoureuse au niveau de la preuve [P2].

Le chapitre 4 présente une série d'illustrations numériques du modèle MOSAIC. On considère des géométries de milieux fissurés particulières pour lesquelles il est possible d'effectuer des simulations directes. Cela nous permet de tester numériquement l'approche homogénéisée MOSAIC, en résolvant le problème de diffusion sur le domaine moyen ne contenant plus la description des fissures. Le domaine moyen est ainsi beaucoup plus simple à mailler : le pas de la discrétisation n'a plus besoin d'être adapté à l'échelle microscopique des fissures. L'effet des fissures est modélisé de façon moyenne par un terme source volumique dans l'équation de la chaleur homogénéisée. On propose alors deux manières de résoudre numériquement le modèle MOSAIC qui se distinguent par la manière de traiter la couche limite au bord de la fissure. D'une part, on propose une résolution par formulation faible où l'effet de la singularité au bord de la fissure est traité de manière approximative. D'autre part, on expose une méthode de point fixe, donnant des résultats plus précis, mais en des temps calculs plus longs. L'étude de l'erreur numérique montre que la solution issue des calculs directs converge bien vers la solution du problème homogénéisé [P2].

Les chapitres 5 et 6 achèvent la première partie du manuscrit consacrée à l'étude de l'équation de la chaleur en milieux fissurés en présentant des extensions de la méthode mise au point à des configurations de fissures plus complexes. En particulier, le chapitre 5 évoque l'extension de la méthode à des milieux mal connus où la largeur des fentes devient une variable aléatoire. La solution du problème homogénéisé correspond alors à l'espérance des solutions des différents problèmes microscopiques associés à chaque largeur de fente possible. La méthode de résolution du problème stochastique est aussi illustrée par des calculs numériques effectués dans le cas où la largeur des fentes suit une variable aléatoire discrète [A2].

Au chapitre 6, on présente une approche différente consistant à établir des bornes sur la conductivité effective de milieux hétérogènes non-périodiques dont la loi de comportement est non-linéaire. On expose en particulier la méthode dite de "translation", issue de la théorie de l'homogénéisation appliquée à la modélisation des milieux composites. Cette méthode est employée en combinaison avec l'idée dite "d'immersion" consistant à dupliquer artificiellement l'espace physique de manière à accroître la dimension de l'espace de travail dans lequel on effectue la recherche des bornes. Cette technique originale peut alors permettre d'améliorer les bornes existantes, a priori non optimales dans le contexte des lois de comportement non-linéaires.

La seconde partie du manuscrit traite d'un tout autre champ de la physique multi-

échelle. On s'intéresse dans cette partie à la modélisation cinétique des particules rapides produites par réactions de fusion dans une cible de FCI. La motivation principale est d'aboutir à une description fine du processus de combustion des cibles, abordée au niveau cinétique. Ceci permet en particulier de mettre en évidence des effets de transport *non-locaux*, que l'on ne peut traiter dans une approche fluide classique. On met en particulier au point une approche multi-échelle de l'opérateur de Fokker-Planck modélisant le ralentissement de particules très énergétiques dans le plasma réactif de la capsule FCI. Il s'agit en fait d'une technique numérique spécifique adaptée à la nature multi-échelle du couplage entre les produits de fusion et les ions thermiques du plasma de deuterium-tritium.

Bien qu'en apparence décorrélé de la première partie, nous verrons que le traitement de l'aspect multi-échelle du problème présente en fait des similarités : en particulier, la technique multi-échelle mise au point dans la seconde partie s'appuie sur une analyse asymptotique du modèle mathématique sous-jacent, et se retrouve en suivant une démarche assez proche de celle développée dans la première partie. Nous verrons ainsi que le traitement de l'aspect multi-échelle par l'analyse asymptotique se retrouve quelque peu en filigrane des deux parties, et donne une certaine cohérence au manuscrit en permettant d'établir une certaine unité dans les manières d'aborder un problème multi-échelle.

Nous entamons la seconde partie en donnant une caractérisation des différentes échelles spatio-temporelles associées aux milieux plasmas.

Au chapitre 2, on reprend quelques éléments de la théorie cinétique afin d'introduire le formalisme de Fokker-Planck appliqué au plasma. On part de la description complète du système impliquant la fonction de distribution à N particules régie par l'équation de Liouville. Par intégrations successives, on fait apparaître une hiérarchie d'équations (hiérarchie de B.B.G.K.Y), où la fonction de distribution à s particules est pilotée par la fonction de distribution à $s + 1$ particules. On prend ensuite en compte le fait que, dans un plasma de fusion, les corrélations sont faibles. Il est alors suffisant de ne prendre en compte que les corrélations à deux points, que l'on interprète comme un terme de collisions. Il s'agit ensuite de préciser la forme du terme de collisions en étudiant le processus microscopique d'interaction Coulombienne entre deux particules chargées. On montre alors que le mécanisme collisionnel est en fait dominé par les petites déviations angulaires ; cela nous permet de modéliser le terme de collision par un opérateur de type Fokker-Planck. De là, on introduit la forme générale de l'équation de Vlasov-Fokker-Planck, régissant les fonctions de distribution à une particule associées à chaque espèce de particules chargées présentes dans le plasma. On montre finalement comment passer de la description cinétique à l'hydrodynamique, en prenant les moments successifs de l'équation cinétique. Il apparaît une cascade d'équations couplées, que l'on doit tronquer par une équation de fermeture, appelée l'équation d'état.

L'objectif du chapitre 3 est d'établir une modélisation cinétique applicable au cas du combustible d'une cible réaliste de FCI. On cherche en effet à simuler numériquement le système d'équations cinétiques couplées décrivant le fonctionnement des capsules d'hydrogène. Aux échelles de temps et d'espace qui nous intéressent, on montre que la modélisation cinétique associée aux électrons, caractérisés par des temps de collision courts et une dynamique rapide du fait de leur faible masse, dégénère en une approche fluide. On présente ainsi un modèle hybride couplant un modèle cinétique de type Vlasov-Fokker-Planck pour

chaque espèce d'ions avec une modélisation fluide des électrons. Cette formulation mixte est établie à partir d'un développement asymptotique du modèle cinétique complet selon le petit paramètre $\varepsilon = \sqrt{m_e/m_i}$, m_e étant la masse électronique et m_i la masse du proton ($\varepsilon \sim 0.022$).

Les chapitres 4 à 7 constituent le cœur de la seconde partie, rassemblant des résultats et des méthodes originales, à la fois sur le plan de l'analyse multi-échelle, ainsi que sur le plan de la physique de la combustion. Ces chapitres reprennent l'essentiel des publications [P3] et [P4].

Le chapitre 4 introduit la problématique de la combustion des cibles FCI sous l'angle de l'analyse multi-échelle. On commence par rappeler la nécessité d'un traitement cinétique rigoureux pour les particules α suprathermiques produites par les réactions de fusion, caractérisées par un libre parcours moyen proche de la taille du système. On expose ensuite le caractère multi-échelle du problème, en notant que deux échelles d'énergie sont clairement identifiables dans la problématique à traiter. On propose alors une approche multi-échelle du processus de ralentissement des particules rapides, permettant de décrire naturellement le caractère bimodal de la fonction de distribution associée aux particules α . De manière qualitative, une composante suprathermique, évoluant sur l'échelle d'énergie macroscopique (correspondant au domaine suprathermique \sim MeV), ralentit par le jeu des collisions et alimente une composante thermique, évoluant sur une échelle d'énergie microscopique, correspondant au domaine d'énergie thermique (\sim keV). Afin de modéliser et simuler efficacement cette phénoménologie, on propose une approche multi-échelle basée sur une décomposition de l'opérateur de Fokker-Planck en un système de deux équations couplées, chaque équation régissant une des deux échelles d'énergie à traiter. Un terme de couplage traduit l'alimentation de la composante thermique par la composante suprathermique. On montre que cette formulation est bien équivalente à l'opérateur de Fokker-Planck initial appliqué aux particules α , et assure donc la conservation des moments associés à la fonction de distribution des particules α [P3].

Enfin, le chapitre 5 permet de faire le lien avec la première partie du manuscrit. On montre en effet que l'on peut retrouver la technique multi-échelle développée spécifiquement pour les particules α en effectuant un développement asymptotique de l'opérateur de Fokker-Planck par rapport au petit paramètre ε correspondant au rapport des échelles d'énergie caractérisant les populations d'ions à modéliser. En particulier, on effectue une mise à l'échelle des fonctions de distribution cibles thermiques, apparaissant très localisées du point de vue des particules rapides. On montre alors que l'équation limite régissant l'échelle suprathermique correspond bien à une advection conservative dans l'espace des vitesses. Ceci permet de retrouver la stratégie mise en place au chapitre précédent pour résoudre efficacement le couplage multi-échelle entre les particules rapides et les ions thermiques.

Le chapitre 6 est le plus numérique de tous. Il regroupe l'ensemble des algorithmes développés pour résoudre le système d'équations de type Vlasov-Fokker-Planck appliqué aux ions thermiques et aux particules α suprathermiques. On propose en particulier une méthode numérique originale de type explicite -appelée algorithme LSE (*Locally Sub-cycled Explicit*) [P3]- pour résoudre la phase de ralentissement collisionnel de la composante suprathermique des particules α . On montre qu'une interprétation locale des conditions

de stabilité permet d'assigner à chaque maille de l'espace des vitesses suprathermiques un pas en temps local, par rapport auquel on définit un sous-cyclage itératif. Ceci s'avère une méthode adaptée pour traiter une situation où les coefficients pilotant le ralentissement des particules rapides sont très inhomogènes dans l'espace des vitesses. Dans ce cas très spécifique, les méthodes usuelles de type implicite donneraient lieu à une matrice mal conditionnée. Ceci conduit à des développements numériques originaux couplés aux méthodes numériques relatives à l'échelle thermique. Ces dernières, initialement reprises du code cinétique FPION [18], ont dû être adaptées au formalisme bimodal introduit pour traiter l'échelle suprathermique des produits de fusion. L'architecture complète du code a dû évoluer pour tenir compte du couplage multi-échelle entre une composante suprathermique et une composante thermique. Le code a été ainsi reconstruit intégralement pour devenir le code FUSE, pour *Fpion Upgrade with two Scales of Energy* [P3]. Le code a la particularité de traiter deux maillages en vitesse en chaque point de l'espace. Chaque maillage en vitesse est caractérisé par un pas de discrétisation adapté à l'échelle à résoudre.

Par souci d'exhaustivité, nous décrivons l'ensemble des méthodes numériques mises au point relatives à la simulation numérique des espèces thermiques et suprathermique, en insistant sur la technique numérique de couplage entre les deux échelles d'énergie du problème représentées sur des grilles en vitesse distinctes. Le code est ensuite validée sur un certain nombre de problèmes tests pertinents pour la FCI et pour lesquels on dispose de solutions de référence.

La technique multi-échelle proposée consiste à gérer conjointement et de façon couplée les deux échelles d'énergie. En particulier, chaque maillage en vitesses est adapté à l'échelle de variation associée à la composante discrétisée en vitesse. L'effort de discrétisation est ainsi réparti de manière optimale, et les temps de résolution sont relativement rapides. On peut ainsi appliquer le code cinétique FUSE pour simuler numériquement le fonctionnement complet de configurations réalistes rencontrées en FCI. Cela fait l'objet du chapitre 7. On s'intéresse en particulier à la description cinétique de la phase de combustion, pour laquelle on voit des écarts importants par rapport aux résultats de simulation d'un code fluide, dans lequel le ralentissement des particules rapides est traité de manière approximative au moyen d'un modèle de diffusion corrigée. En particulier, on met en évidence l'existence d'un précurseur cinétique dans la structure de la flamme de combustion, lié à la nature *non-locale* du transport des produits de fusion [P4].

On propose finalement dans l'annexe C quelques extensions naturelles de la technique multi-échelle mise au point pour modéliser les particules rapides. On évoque en particulier la possibilité de traiter les collisions à grand angle impliquant par exemple un ion thermique (D,T) et une particule α suprathermique. Ce type de processus collisionnel peut alors engendrer un ion D ou T suprathermique par transfert d'énergie de la particule rapide vers la cible thermique. Pour modéliser un tel effet, l'opérateur de Fokker-Planck ne s'applique plus et il est nécessaire de revenir à l'expression intégrale de Boltzmann. Par ailleurs, on montre qu'il est possible de simplifier le terme intégral en tenant compte là encore du contraste d'énergie entre la cible thermique et la particule rapide incidente. Le terme source peuplant une composante suprathermique pour les espèces ioniques initialement thermiques (D ou T), prend alors la forme d'un moment particulier de la composante suprathermique associée aux particules α . L'anisotropie du terme source (par opposition

à l'isotropie de terme source modélisant les réactions de fusion) implique a priori un calcul de moment dans chaque maille de l'espace des vitesses suprathermiques.

Une seconde extension du travail effectué sur les particules α est ensuite décrite : on montre qu'il est possible, sans difficulté de principe, de coupler le modèle cinétique à deux échelles d'énergie mis au point pour les particules α avec un modèle fluide appliqué à des espèces ioniques fortement collisionnelles, dont le traitement cinétique se révélerait trop coûteux et pas forcément nécessaire. Ceci permettrait en particulier d'améliorer la représentativité des simulations cinétiques en incorporant l'ablateur en CH¹ de manière cohérente avec la modélisation cinétique du combustible DT.

En conclusion générale, on revient sur l'ensemble des problèmes traités dans les deux parties du manuscrit en remarquant qu'une certaine unité se dessine dans la manière d'aborder les couplages multi-échelles. On revient sur les différentes méthodes originales développées et sur les principaux résultats physiques mis en évidence.

1. mélange de carbone C et d'hydrogène H, présent dans les cibles FCI sous la forme d'une coquille externe englobant le combustible DT. L'irradiation de cette coquille plastique par un flux d'énergie intense (sous forme d'énergie Laser ou d'énergie X) génère la pression d'ablation pilotant l'implosion de la capsule.

Publications

Articles parus ou acceptés pour publication

[P1] X. Blanc, B.E. Peigney, Homogeneization of heat equation in a cracked medium, *C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I* **352** 405-409 (2014)

[P2] X. Blanc, B.E. Peigney, Homogeneization of heat equation in a cracked medium, *Multiscale Model. Simul.*, **12** No. 2, 879-906 (2014)

[P3] B.E. Peigney, O. Larroche, V. Tikhonchuk, Fokker Planck kinetic modeling of suprathermal α -particles in a fusion plasma, *J. Comput. Phys.* **278** 416-444 (2014), pre-print available at <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2014.08.033>

[P4] B.E. Peigney, O. Larroche, V. Tikhonchuk, Ion kinetic effects on the ignition and burn of ICF targets : a multi-scale approach, *Phys. Plasmas* **21** 122709 (2014), pre-print available at <http://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01061545>

Autres travaux

[A1] B.E. Peigney, Fokker Planck kinetic modeling of suprathermal α -particles in a fusion plasma : a multi-scale approach, *41st EPS Conference on Plasma Physics*, abstract available at <http://ocs.ciemat.es/EPS2014ABS/pdf/O2.207.pdf>.

[A2] X. Blanc, B.E. Peigney, Homogeneization of heat equation in a random cracked medium, *in preparation*.

[A3] B.E. Peigney, M. Peigney, Improved non-linear bounds for transversely isotropic composites in conductivity problems, *in preparation*.

Première partie

Homogénéisation d'un processus de diffusion en milieu fissuré

Table des figures

1	"Sous la vague au large de Kanagawa", d'Hokusai	3
1.1	Le domaine composite Ω pour le problème de conductivité.	24
1.2	Structure du problème homogénéisé pour le problème de la conductivité posé dans un matériau multi-échelle périodique.	32
2.1	Le domaine fissuré Ω_ε	37
2.2	Le domaine A_δ associé à la couche limite en $\{x = 0\}$	42
2.3	Le domaine fissuré Ω_ε et le le domaine homogénéisé Ω	46
3.1	Contours d'intégration du domaine $\tilde{\Omega}_{\varepsilon,\delta}$	68
4.1	Comparaison calculs directs/modèle homogénéisé MOSAIC - Fissuration faible ($\alpha = 0.1$).	73
4.2	Synthèse des approches - Fissuration faible ($\alpha = 0.1$).	76
4.3	Synthèse des approches - Fissuration importante ($\alpha = 0.6$).	77
4.4	Erreur numérique associée au modèle homogénéisé en fonction de la période ε	78
5.1	Le milieu fissuré non-périodique et le motif élémentaire $\Omega_{i+1/2}$	80
5.2	Résolution directe de l'équation de diffusion dans un milieu fissuré aléatoire	85
5.3	Comparaison des approches de résolution dans le cas aléatoire.	86
6.1	Exemple de milieux fissuré hétérogène.	88
6.2	Matériaux composites hétérogènes.	89
6.3	Matériaux composites laminés atteignant les bornes de Voigt et Reuss. . .	90
6.4	Assemblage de sphères tapissées atteignant la borne de Hashin-Shtrikman.	90
6.5	Représentation des bornes de Hashin-Shtrikman.	96
6.6	Amélioration de la borne inférieure sur la conductivité effective dans le cas rigide.	106
6.7	Amélioration de la borne inférieure sur la conductivité effective dans le cas bi-phasé (contraste fini).	107
2.1	Collision entre deux particules chargées en interaction Coulombienne . . .	132
2.2	Composantes de la variation $\Delta \vec{u}$ du vecteur vitesse relative.	140
2.3	Effet de l'opérateur de Fokker-Planck sur les fonctions de distribution . . .	142
3.1	Importance des effets cinétiques dans le schéma d'attaque indirect.	153
3.2	Configuration et ordres de grandeur des quantités hydrodynamiques pour l'implosion d'une cible de type NIF-mégajoule.	154

TABLE DES FIGURES

3.3	Couplage multi-échelle entre les électrons et les ions thermiques	158
4.1	Représentation schématique de la relaxation collisionnelle des particules α sur les ions cibles thermiques i	176
6.1	Représentation des deux maillages en vitesse pour modéliser les deux composantes de la fonction de distribution des particules α	193
6.2	Exemples de fonction de distribution non-Maxwellienne que l'on souhaite pouvoir traiter dans le code cinétique.	195
6.3	Comportement asymptotique des potentiels de Rosenbluth.	196
6.4	Transformation des coordonnées de l'espace des phases pour l'advection en géométrie sphérique.	205
6.5	Paramétrisation polaire du maillage en vitesse suprathermique.	212
6.6	Carte du sous-cyclage correspondant à l'algorithme LSE.	218
6.7	Maillage central pour la grille de vitesse suprathermique.	221
6.8	Evolution temporelle de la fonction de distribution des particules α correspondant au cas test isotrope.	230
6.9	Fonction de distribution des α (composante suprathermique) pour le problème test d'une relaxation collisionnelle.	232
6.10	Evolution temporelle de la vitesse correspondant au maximum de la fonction de distribution des α (composante suprathermique) pour le cas test d'une relaxation collisionnelle anisotrope.	232
6.11	Evolution temporelle des températures ioniques et électroniques, ainsi que de la densité de particules α pour deux cas test de relaxation collisionnelle.	234
7.1	Diagramme de marche du combustible DT en implosion.	241
7.2	Performances intégrées : puissance de fusion et masse surfacique.	243
7.3	Performances intégrées : températures et pressions centrales.	244
7.4	Dislocation du combustible et puissance totale.	245
7.5	Profils de densité avant la convergence du choc, à $t = 17500$ ps.	246
7.6	Comparaison des résultats des simulations fluide et cinétique durant la phase d'implosion.	247
7.7	Comparaison des résultats des simulations fluide et cinétique au voisinage de la stagnation.	248
7.8	Profils spatiaux des logarithmes de Coulomb au temps $t = 17650$ ps.	249
7.9	Comparaison des températures et densités ioniques centrales (pour chaque espèce) durant la phase d'implosion entre le calcul fluide et cinétique.	249
7.10	Effets cinétiques pendant l'implosion.	252
7.11	Effets hors-équilibre durant l'implosion.	253
7.12	Profils spatiaux de taux de réaction de fusion dans le combustible DT.	254
7.13	Comparaison des résultats des simulations fluide et cinétique durant le début de la phase de combustion.	255
7.14	Profils spatiaux de densité associés aux deux composantes de la fonction de distribution des particules α considérés pendant le début de la phase de combustion.	256

7.15	Profils de température ionique et puissance de fusion dégagée dans une simulation cinétique où le transport des particules α est artificiellement localisé.	257
7.16	Comparaison des structures de flamme pendant la naissance et la propagation du front de combustion.	258
7.17	Comparaison des flux de chaleur ionique et électronique durant la propagation de la flamme entre les calculs fluide et cinétique.	259
7.18	Comparaison des profils de densité et vitesse moyenne pendant la phase de propagation de la flamme au sein du combustible dense.	260
7.19	Conditions thermodynamiques et rayon de la cellule spatiale test choisie pour l'étude locale du processus de combustion.	261
7.20	Ralentissement des particules α suprathermiques observé dans la cellule spatiale test considérée.	261
7.21	Alimentation de la composante thermique par la composante suprathermique associée aux particules α	262
7.22	Evolution temporelle de la composante suprathermique des particules α pendant le processus de combustion.	262
23	Différentes formes de couplages multi-échelles.	270
C.1	Relation entre la variation de vitesse et l'angle de déviation dans une collision à grand angle.	284

TABLE DES FIGURES

Introduction de la première partie

Dans cette première partie, on traite la modélisation d'un phénomène de diffusion dans un milieu fissuré. Par souci de simplicité, nous faisons les deux hypothèses suivantes :

- le milieu fissuré est supposé périodique
- le processus de diffusion est linéaire.

Ces hypothèses d'étude nous permettent d'arriver plus simplement à la formulation du modèle moyen et d'élaborer une preuve rigoureuse de convergence.

Le milieu fissuré est soumis à un flux de chaleur en provenance d'une source extérieure. La matrice du milieu est supposée être conductrice de la chaleur, tandis que les fissures sont supposées être vides. Les fissures étant de taille très petite par rapport à la taille du système considéré, il s'agit clairement d'un problème où deux échelles spatiales bien contrastées coexistent : les fissures sont décrites par l'échelle dite microscopique et influent sur la diffusion de la chaleur dans l'ensemble du domaine observé à l'échelle macroscopique.

D'un point de vue phénoménologique, la présence de fissures modifie significativement la surface d'échange entre la source d'énergie et le milieu fissuré et perturbe le bilan énergétique global du système. Dans de nombreuses situations réelles, la complexité du milieu fissuré est telle que l'on ne peut aborder le problème directement. En effet, soit la caractérisation du milieu est incomplète (comme c'est souvent le cas en pratique pour les milieux hétérogènes), soit la discrétisation spatiale du système réel requiert des ressources mémoires bien au delà de la capacité des architectures informatiques actuelles.

Pour résoudre un tel problème multi-échelle, on se propose de suivre le chemin de l'homogénéisation, en plongeant le modèle physique contenant l'échelle microscopique ε dans une suite de problèmes où ε devient un petit paramètre que l'on fait tendre vers 0. On est ainsi susceptible d'obtenir une équation limite. On peut ensuite résoudre le problème limite par une approche numérique classique (par une méthode d'éléments finis par exemple). La solution numérique obtenue constitue alors une bonne approximation de la solution du problème initial.

On cherche donc à appliquer les outils théoriques issus de l'homogénéisation afin de proposer une approche moyenne qui permette de répondre au problème étudié au niveau macroscopique en des temps calculs non prohibitifs.

Ce travail s'inscrit dans la lignée des travaux [11, 2, 23, 13]. Dans la référence [11] en particulier, les auteurs traitent le cas elliptique dans un domaine périodique perforé. Les conditions aux limites sont donc de type Neumann au bord des trous et de type Dirichlet au bord du grand domaine. La cellule périodique est de taille ε et contient en son sein un trou centré de taille $(\varepsilon^\alpha, \alpha > 1)$. Les auteurs montrent que lorsque l'on fait tendre ε vers 0, on arrive à un modèle limite qui est encore de type elliptique mais avec

un terme supplémentaire dépendant du paramètre pilotant la taille des trous. Ce "terme étrange" est en fait issu du processus d'homogénéisation. Nous verrons qu'un processus assez semblable se produit dans notre problème de diffusion : la forme limite reste bien de type parabolique, mais avec un terme source supplémentaire traduisant l'effet de l'échelle microscopique au niveau du modèle macroscopique.

Aussi, la configuration du problème que l'on traite est originale par rapport aux références [2, 23, 13] : dans ces travaux, les auteurs considèrent un domaine borné par une paroi rugueuse caractérisée par des oscillations périodiques d'amplitudes microscopiques. Ceci diffère du milieu fissuré que l'on considère, où la profondeur des fissures est de taille macroscopique. En outre, le modèle étudié dans ces références correspond à l'équation stationnaire de Navier-Stokes, tandis que nous étudions le cas de la diffusion linéaire instationnaire.

Les résultats originaux établis dans cette première partie sont les suivants :

- En suivant une approche par développement asymptotique, on arrive à la formulation d'un modèle homogénéisé permettant de traiter le cas de la diffusion instationnaire de la chaleur dans un milieu périodique fissuré caractérisé par des fissures de largeur microscopique mais de profondeur macroscopique.
- Un effet de couche limite est mis en évidence et étudié rigoureusement au voisinage du bord vertical des fissures.
- Une approche par point fixe est mise en place pour montrer que le modèle homogénéisé est bien posé.
- Une preuve de convergence est établie de manière originale : elle ne repose pas sur les outils généraux habituellement employés en théorie de l'homogénéisation, comme la méthode des fonctions test oscillantes de Tartar [45] (dite aussi méthode d'énergie), ou la convergence à deux échelles [36, 3]. La preuve s'appuie en fait sur la construction de sommes de Riemann particulières, adaptées à la géométrie du milieu fissuré. Le principe de la preuve est de borner la solution du problème exact indépendamment de la période ε , pour extraire une sous-suite convergeant faiblement. Cela permet alors de passer à la limite dans les intégrales intervenant dans la formulation faible du modèle exact et de retrouver la formulation faible du problème homogénéisé.
- Plusieurs méthodes numériques sont enfin proposées pour résoudre efficacement le problème homogénéisé. La résolution est compliquée par l'existence de la couche limite au voisinage du bord des fissures. Cette couche limite est en effet telle qu'il n'est pas possible d'écrire le modèle homogénéisé sous la forme d'un unique problème aux limites posé sur l'ensemble du domaine homogénéisé.
- Nous donnons finalement une conjecture formelle qui étend l'approche par homogénéisation pour traiter des configurations fissurées aléatoires.

Nous commençons par rappeler les principaux résultats issus de l'homogénéisation sur lesquels nous nous sommes appuyés pour élaborer le modèle moyen et en déduire une méthode de calcul très générale, permettant de prendre en compte au niveau macroscopique l'effet des fissures microscopiques. Pour ce faire, nous reprenons au chapitre 1 les techniques d'homogénéisation appliquées au problème de la conductivité linéaire dans un milieu composite périodique. Les détails du problème de diffusion traité sont ensuite ex-

posés dans le chapitre 2. Une approche par analyse asymptotique nous permet d'élaborer la formulation du modèle homogénéisé. Le chapitre 3 expose les détails de la preuve de la convergence du modèle exact vers le modèle homogénéisé. Cela permet de préciser en quel sens le modèle homogénéisé correspond à la limite du modèle exact lorsque l'échelle microscopique tend vers 0. Le chapitre 4 présente alors une série d'illustrations numériques. On montre que l'approche par homogénéisation permet d'aller plus loin que l'approche directe, en particulier lorsque la taille des fissures devient très petite. Les chapitres 5 et 6 présentent quelques extensions et prolongements de la méthode par homogénéisation, en vue de traiter des configurations plus complexes.

1

Techniques d'homogénéisation

Sommaire

1.1	Introduction	23
1.2	Problème considéré	24
1.3	Propriétés du problème elliptique	25
1.3.1	Cas général	25
1.3.2	Cas périodique	27
1.4	Le développement à deux échelles	27
1.5	Structure du modèle homogénéisé	31
1.6	Notion de correcteurs	33

1.1 Introduction

L'homogénéisation [7], [10], [25] a pour but de décrire le comportement effectif d'un système multi-échelle à partir des informations relatives à l'échelle microscopique. L'homogénéisation a d'abord été développée pour traiter des structures périodiques, où la taille de la période ε est petite comparée à la taille du système. L'idée est alors de plonger le problème microscopique à ε donné, dans une *suite* de problèmes aux limites, paramétrés par ε qui devient un paramètre tendant vers 0. On cherche alors à étudier la convergence de cette suite de problèmes. L'éventuelle limite (en un sens que l'on cherche à préciser) constitue le modèle homogénéisé, duquel on peut déduire une loi de comportement effective, intégrant à l'échelle macroscopique les détails de la micro-structure.

Dans ce chapitre introductif, nous reprenons l'exemple bien connu du problème de conductivité linéaire dans un milieu composite périodique. Sans reprendre tous les détails des démonstrations, pour lesquels nous renvoyons à [7], nous nous intéressons en particulier à deux points spécifiques :

- la technique mathématique conduisant au modèle effectif
- la structure du modèle homogénéisé et la manière dont se couplent les deux échelles spatiales du problème.

Le premier point nous permet d'introduire l'approche par développement asymptotique que l'on reprendra par la suite pour le problème de diffusion en milieux fissurés. Le

second nous donne un premier exemple de couplage entre échelles et nous servira de point de comparaison par rapport aux différentes stratégies de couplage multi-échelle mises en place dans ce travail.

1.2 Problème considéré

Nous considérons le problème de la conductivité linéaire dans un milieu hétérogène périodique Ω correspondant par exemple à un mélange de deux phases, l'une formant la matrice du milieu et l'autre correspondant à des inclusions (remplies d'un autre constituant, voir Fig.1.1). La taille des inclusions est supposée être très petite devant la taille du domaine à traiter. En outre, les inclusions sont arrangées périodiquement dans toutes les directions, séparées d'une distance ε . La conductivité du milieu A varie donc périodiquement dans chaque direction de l'espace.

Le problème considéré est donc caractérisé par deux échelles spatiales :

- une échelle microscopique, correspondant à l'échelle de variation rapide de la conductivité localisée au niveau de chaque inclusion de taille ε ,
- une échelle macroscopique, correspondant à une variation spatiale plus lente et s'étalant sur tout le domaine Ω .

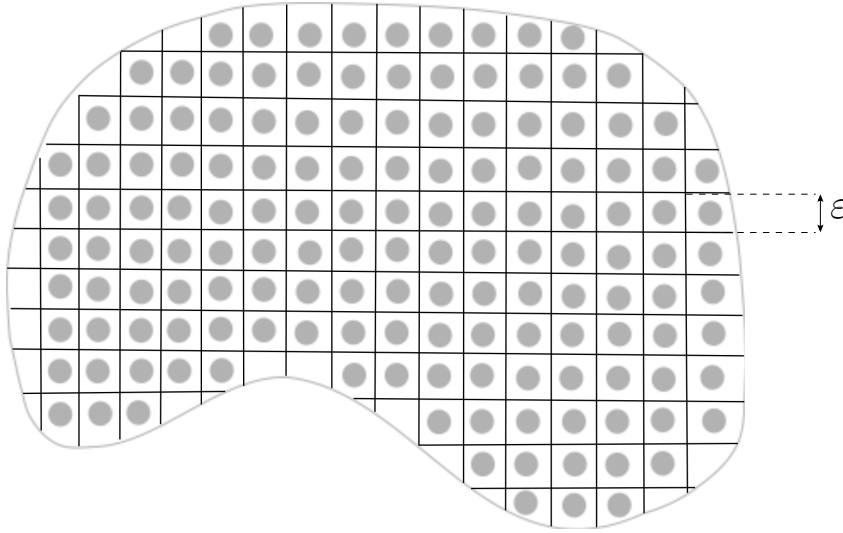


FIGURE 1.1 – Le domaine composite Ω pour le problème de conductivité.

Le milieu est périodique de période ε .

Pour simplifier l'exposé, nous considérons des conditions au limite de type Dirichlet, et supposons que la conductivité (éventuellement de nature tensorielle) est bornée et reste suffisamment loin de 0. Plus précisément, on considère que la matrice de conductivité A_ε vérifie les inégalités dites de coercivité :

$$\begin{cases} (A_\varepsilon \gamma, \gamma) \geq \alpha \|\gamma\|^2 \\ \|A_\varepsilon(x) \gamma\| \leq \beta \|\gamma\| \end{cases} \quad (1.1)$$

On désigne par $M(\alpha, \beta, \Omega)$ l'ensemble des matrices vérifiant l'hypothèse de coercivité.

Nous prendrons également une matrice de conductivité A_ε symétrique, bien que tout ce qui suit puisse se généraliser naturellement dans le cas non-symétrique.

Pour un terme source f régulier et donné, le problème aux limites de la conductivité linéaire s'écrit suivant :

$$\begin{cases} -\operatorname{div} \left(A\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) \nabla u_\varepsilon \right) = f & \text{dans } \Omega, \\ u_\varepsilon = 0 & \text{sur } \partial\Omega. \end{cases} \quad (1.2)$$

La matrice de conductivité A_ε (voir (1.1)) s'écrit sous la forme :

$$A_\varepsilon(x) = A\left(\frac{x}{\varepsilon}\right).$$

D'un point de vue numérique, on pressent que la résolution directe du problème (1.2) (par exemple par différences finies) requiert un pas de maillage h au moins inférieur à la période ε du domaine Ω . En effet, si le pas h de la discrétisation spatiale est trop grand, on risque de ne pas capturer les oscillations de la conductivité $A(\frac{\cdot}{\varepsilon})$ se produisant à l'échelle ε , de sorte que la solution numérique obtenue peut ne pas correspondre au problème réel donné par (1.2).

L'approche directe risque donc de coûter très cher voire se révéler inextricable pour résoudre un tel problème.

Remarque 1.2.1 *Dans certains cas pratiques, le domaine multi-échelle devient même impossible à mailler en dessous d'un certain seuil pour la variable ε représentant l'échelle microscopique (voir en particulier le chapitre 4 sur les illustrations numériques de la méthode par homogénéisation développée au chapitre 2).*

La stratégie que l'on envisage consiste plutôt à chercher si l'équation (1.2) converge vers une équation limite quand ε tend vers 0. Si tel est le cas, on cherchera à résoudre l'équation limite, appelée *équation homogénéisée*. La résolution numérique de l'équation limite pourra alors se faire avec un pas de maillage qui ne sera plus nécessairement petit devant ε . La solution ainsi obtenue u^* constituera une bonne approximation de la solution exacte u_ε du problème de départ (1.2), dans la limite où ε reste petit.

Ainsi, au lieu d'étudier le problème à ε fixé, où la valeur du ε est dictée par la physique du problème, on *immerge* le problème de départ dans une suite de problèmes indexés par ε qui est maintenant vu comme un petit paramètre tendant vers 0. On est donc amené à traiter un problème de convergence d'une suite de fonctions u_ε , solutions du problème direct (1.2), vers une éventuelle limite u solution d'une équation limite, dont la forme est à déterminer.

1.3 Propriétés du problème elliptique

1.3.1 Cas général

Dans le cas général (pas nécessairement périodique), le problème aux limites de la conductivité (1.2) vérifie les propriétés générales suivantes, dont la démonstration est par exemple exposée dans [10] (chapitre 4) :

- Tout d'abord, le problème (1.2) possède une unique solution et satisfait l'estimation :

$$\|u_\varepsilon\|_{H_0^1(\Omega)} \leq \frac{1}{\alpha} \|f\|_{H^{-1}(\Omega)}$$

- En outre, la suite de vecteurs $\xi_\varepsilon = A_\varepsilon \nabla u_\varepsilon$ vérifie l'inégalité :

$$\|A_\varepsilon \nabla u_\varepsilon\|_{L^2(\Omega)} \leq \frac{\beta}{\alpha} \|f\|_{H^{-1}(\Omega)}$$

- On conclut des deux majorations précédentes qu'il est possible de trouver une sous-suite extraite telle que :

$$\begin{cases} i) & u_{\varepsilon'} \rightharpoonup u_0 \text{ faiblement dans } H_0^1(\Omega) \\ ii) & \xi_{\varepsilon'} \rightharpoonup \xi_0 \text{ faiblement dans } (L^2(\Omega))^N \end{cases} \quad (1.3)$$

- On a de plus :

$$-\operatorname{div} \xi_0 = f \text{ dans } \Omega. \quad (1.4)$$

On se pose alors la double question suivante :

- la limite faible u_0 vérifie-t-elle un certain problème aux limites dans Ω ?
- si tel est le cas, u_0 est-elle uniquement déterminée ?

Au vue de l'équation (1.4) vérifiée par la limite faible ξ_0 , on peut répondre par l'affirmative à la première question si l'on sait exprimer ξ_0 en fonction de u_0 .

Remarque 1.3.1 *Remarquons que si l'on avait une convergence forte de A_ε vers une certaine matrice \hat{A} dans $[L^\infty(\Omega)]^{N \times N}$, N étant la dimension du problème, alors on pourrait en déduire immédiatement une relation entre u_0 et ξ_0 . On sait en effet que le produit d'une suite qui converge fortement par une suite qui converge faiblement, converge faiblement. Comme on sait qu'il existe une sous-suite $u_{\varepsilon'} \rightharpoonup u_0$ faiblement dans $H_0^1(\Omega)$, on aurait :*

$$\lim_{\varepsilon' \rightarrow 0} \int_{\Omega} A_{\varepsilon'} \nabla u_{\varepsilon'} \varphi = \int_{\Omega} \hat{A} \nabla u_0 \varphi,$$

pour toutes fonctions test φ de $[L^2(\Omega)]^N$. Comme, d'autre part, la suite de vecteurs ξ_ε converge faiblement et à extraction près, vers ξ_0 , l'égalité précédente impliquerait que :

$$\xi_0 = \hat{A} \nabla u_0,$$

c'est à dire que la limite faible u_0 serait l'unique solution du problème aux limites :

$$\begin{cases} -\operatorname{div} (\hat{A} \nabla u_0) = f & \text{dans } \Omega, \\ u_0 = 0 & \text{sur } \partial\Omega. \end{cases}$$

Comme la solution de ce problème est unique, toute la suite u_ε convergerait vers u_0 , sans extraction particulière. u_0 serait alors uniquement déterminée. Néanmoins, une telle convergence forte ne se produit en fait jamais dans le contexte des milieux composites : on ne peut avoir qu'une convergence faible de $A_{\varepsilon'}$ et l'on ne peut a priori rien dire sur la convergence du produit $A_{\varepsilon'} \nabla u_{\varepsilon'}$.

En fait, comme on le reverra plus en détail au chapitre 5 relatif aux problèmes aléatoires, les conditions de coercivité (1.1) vérifiées par A_ε impliquent qu'il existe une matrice A^* telle que : $\xi_0 = A^* \nabla u_0$. Néanmoins, dans le cas général, la matrice A^* dépend de la sous-suite considérée pour les convergences de $u_{\varepsilon'}$ et de $\xi_{\varepsilon'}$, et n'est donc pas uniquement déterminée.

1.3.2 Cas périodique

Dans le cas *périodique* considéré dans la suite du chapitre, on peut caractériser la matrice A^* de manière explicite, ce qui montre en particulier que la matrice A^* est en fait indépendante de la sous-suite considérée et est bien uniquement déterminée. Dans ces conditions, la limite u_0 est l'unique solution du problème aux limites :

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(A^* \nabla u_0) = f & \text{dans } \Omega, \\ u_0 = 0 & \text{sur } \partial\Omega. \end{cases} \quad (1.5)$$

qui est un problème de type conductivité linéaire mais avec une matrice de conductivité A^* dite *homogénéisée*.

Par unicité de la solution au problème (1.5), la suite u_ε admet une unique valeur d'adhérence : c'est toute la suite qui converge vers u_0 , qui est ainsi uniquement déterminée.

1.4 Le développement à deux échelles

On étudie la convergence de (1.2) dans le cas périodique. On cherche en particulier à caractériser la matrice homogénéisée A^* . Pour cela, on postule une forme pour la solution u_ε .

On écrit ainsi u_ε comme un développement en puissance de ε :

$$u_\varepsilon(x) = u_0(x, \frac{x}{\varepsilon}) + \varepsilon u_1(x, \frac{x}{\varepsilon}) + \varepsilon^2 u_2(x, \frac{x}{\varepsilon}) + \dots \quad (1.6)$$

Dans ce développement supposé a priori, que l'on appelle parfois "ansatz", chaque fonction u_k apparaissant à l'ordre k a été prise dépendante de deux variables d'espace, à savoir :

- x , qui correspond à l'échelle macroscopique,
- $y = \frac{x}{\varepsilon}$, liée à l'échelle de variation microscopique.

Remarque 1.4.1 *Le développement asymptotique est un postulat qui nous permet de trouver des conditions nécessaires vérifiées par chaque composante u_k et ainsi de trouver la forme de l'équation limite. Ce développement ne tient en particulier pas compte d'éventuelles couches limites qui peuvent se produire au bord du domaine de calcul. Dans de telles situations, la solution u_ε varie brutalement sur une épaisseur de peau au voisinage du bord. On peut alors en tenir compte en incluant des termes supplémentaires dans le développement (1.6). Nous traiterons précisément un exemple de couche limite dans le chapitre suivant consacré à l'homogénéisation d'un processus de diffusion en milieux fissurés.*

Remarque 1.4.2 Le premier terme du développement u_0 coïncide avec la solution u du problème homogénéisé, obtenu à la limite $\varepsilon \rightarrow 0$.

Chaque composante du développement u_k est de plus supposée être périodique par rapport à la variable microscopique $y = \frac{x}{\varepsilon}$:

$y \rightarrow u_k(x, y)$ est ainsi périodique sur la cellule $(0, 1)^N$.

Autrement dit, l'échelle microscopique de taille ε est *dilatée* d'un facteur $\frac{1}{\varepsilon}$ de manière à ramener la modulation microscopique sur un support de taille 1.

La forme (1.6) signifie qu'en chaque point macroscopique x , on considère une oscillation de la fonction $u_k(x, \cdot)$ due à l'échelle microscopique représentée par la partie $u_k(\cdot, \frac{x}{\varepsilon})$ qui est périodique de cellule $(0, 1)^N$.

Ensuite, on injecte le développement (1.6) dans l'équation exacte (1.2) et on en déduit des conditions nécessaires vérifiées par chaque terme de l'ansatz.

On applique ainsi la règle des dérivation des fonctions composées pour calculer le gradient d'une fonction $v(x, \frac{x}{\varepsilon})$:

$$\nabla \left(v(x, \frac{x}{\varepsilon}) \right) = (\nabla_x v)(x, y) + \frac{1}{\varepsilon} (\nabla_y v)(x, y) \text{ en } y = \frac{x}{\varepsilon}.$$

Les opérateurs ∇_x (resp. ∇_y) correspondent aux dérivées partielles de $v(x, y)$ par rapport à x (resp. y). Comme on est en dimension N , il s'agit donc de N -uplets de type $\left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial x_N} \right)$.

Le développement à l'ordre ε du membre gauche de (1.2) s'écrit ainsi :

$$\begin{aligned} -\operatorname{div} \left(A\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) \nabla u_\varepsilon \right) &= -\frac{1}{\varepsilon^2} \operatorname{div}_y (A(y) \nabla_y u_0(y)) \\ &\quad -\frac{1}{\varepsilon} [\operatorname{div}_x (A(y) \nabla_y u_0(y)) + \operatorname{div}_y (A(y) \nabla_x u_0(y)) \\ &\quad + \operatorname{div}_y (A(y) \nabla_y u_1(y))] \\ &\quad -[\operatorname{div}_x (A(y) \nabla_x u_0(y)) + \operatorname{div}_y (A(y) \nabla_x u_1(y)) \\ &\quad \operatorname{div}_x (A(y) \nabla_y u_1(y)) + \operatorname{div}_y (A(y) \nabla_y u_2(y))] \\ &\quad + O(\varepsilon). \end{aligned} \tag{1.7}$$

Le membre de droite de (1.2) étant d'ordre 0 par rapport à ε , le coefficient d'ordre $\frac{1}{\varepsilon^2}$ du développement (1.7) doit être nul, on a donc nécessairement :

$$-\operatorname{div} (A(y) \nabla_y u_0(x, y)) = 0. \tag{1.8}$$

On utilise alors la coercivité de A , appliquée à $\nabla_y u_0(x, y)$, c'est à dire que :

$$c \int_Y \|\nabla_y u_0(x, y)\|^2 \leq \int_Y (A(y) \nabla_y u_0(x, y), \nabla_y u_0(x, y))$$

On effectue une intégration par parties du majorant :

$$c \int_Y \|\nabla_y u_0(x, y)\|^2 \leq - \int_Y \operatorname{div}_y (A(y) \nabla_y u_0(x, y)) u_0(x, y) + \int_{\partial Y} (A(y) \nabla_y u_0(x, y)) \cdot \vec{n} u_0,$$

\vec{n} étant la normale du bord de la cellule ∂Y orientée vers l'extérieur.

Le premier terme du membre de droite de l'équation précédente est nul d'après (1.8), tandis que le second, correspondant au terme de bord s'annule par périodicité en y de $u_0(x, y)$.

On a donc :

$$\nabla_y u_0(x, y) = 0. \quad (1.9)$$

C'est à dire que la fonction u_0 ne dépend que de l'échelle macroscopique x :

$$u_0 = u_0(x). \quad (1.10)$$

Passons à l'ordre $\frac{1}{\varepsilon}$. En utilisant l'information (1.10), on obtient :

$$\operatorname{div}_y (A(y)(\nabla_x u_0(x) + \nabla_y u_1(x, y))) = 0.$$

$u_1(x, y)$ est ainsi solution du problème :

$$\begin{cases} -\operatorname{div}_y (A(y)(\nabla_x u_0(x) + \nabla_y u_1(x, y))) = 0 \text{ sur } Y, \\ u \text{ périodique en } y \text{ au bord } \partial Y. \end{cases} \quad (1.11)$$

Le problème (1.11) donnant u_1 apparaît suivant une équation en y paramétrée par la variable macroscopique x . Comme y et x sont liés par $y = \frac{x}{\varepsilon}$, y balaye le domaine $\frac{1}{\varepsilon}\Omega$ qui est immense lorsque ε tend vers 0. Il paraît ainsi légitime d'assimiler $\frac{1}{\varepsilon}\Omega$ à \mathbb{R}^N . On invoque ensuite la périodicité en y , que l'on postule au niveau de l'ansatz, pour ramener le problème sur la seule cellule Y .

Ainsi, si l'on connaît u_0 , u_1 est alors connue explicitement en résolvant (1.11). Par linéarité, la solution peut s'écrire sous la forme :

$$u_1(x, y) = \sum_{i=1}^N \partial_{x_i} u_0(x) w_i(y), \quad (1.12)$$

où les w_i sont les fonctions solutions du *problème de cellule* (on dit aussi problème de sous-maille, ou encore "cell problem") :

$$\begin{cases} -\operatorname{div}_y (A(y)(e_i + \nabla_y w_i(y))) = 0 \text{ sur } Y, \\ w_i \text{ périodique en } y \text{ au bord } \partial Y. \end{cases} \quad (1.13)$$

où e_i désigne le i -ème vecteur de la base canonique de \mathbb{R}^N .

Remarque 1.4.3 u_1 n'est en fait définie qu'à l'addition d'une fonction $v(x)$ près. Mais, cela n'a pas de conséquence sur le processus d'homogénéisation, puisque ce qui compte c'est $\nabla_y u_1(x, y)$.

Finalement, il nous reste à trouver u_0 pour connaître u_1 .

Pour cela, on utilise l'ordre 0 du développement (1.7) et on l'identifie à f , de sorte que (1.2) soit bien vérifiée.

On obtient alors une équation couplant u_0, u_1 et u_2 :

$$-\operatorname{div}_y (A(y)(\nabla_x u_1(x, y) + \nabla_y u_2(x, y))) = \operatorname{div}_x (A(y)(\nabla_y u_1(x, y) + \nabla_x u_0(x))) + f, \quad (1.14)$$

en imposant pour u_2 la condition de périodicité en y sur le bord ∂Y . On remarque alors que le membre de gauche de l'équation (1.14) s'écrit comme la divergence en y d'une certaine fonction vectorielle périodique $g(y)$.

En appliquant la formule de Green sur une telle fonction :

$$\int_Y \operatorname{div}_y g(y) dy = \int_{\partial Y} g(y) \cdot \vec{n} = 0,$$

par périodicité.

L'intégrale en y du membre droite de (1.14) est par conséquent nulle, ce qui impose :

$$-\operatorname{div}_x \left(\int_Y A(y) (\nabla_y u_1(x, y) + \nabla_x u_0(x)) dy \right) = f(x),$$

où l'on a interverti l'intégration en y et la dérivation en x du fait que ces deux variables sont vues comme des variables indépendantes.

On reprend alors l'expression (1.12) obtenue pour u_1 en fonction de u_0 et des fonctions w_i solutions du problème de cellule (1.13) pour obtenir l'équation sur u_0 :

$$-\operatorname{div}_x \left(\int_Y A(y) \sum_{i=1}^N \partial_{x_i} u_0(x) (\nabla_y w_i(y) + e_i) dy \right) = f(x). \quad (1.15)$$

Or :

$$\int_Y A(y) \sum_{i=1}^N \partial_{x_i} u_0(x) (\nabla_y w_i(y) + e_i) dy = \int_Y A(y) \sum_{i=1}^N (\nabla u_0(x))_i (\nabla_y w_i(y) + e_i) dy.$$

On peut alors sortir $\nabla u_0(x)$ de l'intégrale sur y , en invoquant là encore l'indépendance de x et de y :

$$\int_Y A(y) \sum_{i=1}^N \partial_{x_i} u_0(x) (\nabla_y w_i(y) + e_i) dy = \sum_{i=1}^N (\nabla u_0(x))_i \left(\int_Y A(y) (\nabla_y w_i(y) + e_i) dy \right).$$

On développe alors le produit $A(y)(\nabla_y w_i(y) + e_i)$ sur la base canonique :

$$\int_Y A(y) \sum_{i=1}^N \partial_{x_i} u_0(x) (\nabla_y w_i(y) + e_i) dy = \sum_{j=1}^N \left(\sum_{i=1}^N (\nabla u_0(x))_i \sum_{k=1}^N \int_Y A_{jk}(y) (\nabla_y w_i(y) + e_i)_k dy \right) e_j,$$

où $(\nabla_y w_i(y) + e_i)_k$ désigne la k -ième composante du vecteur $\nabla_y w_i(y) + e_i$ dans \mathbb{R}^N .

On peut récrire cette dernière équation sous la forme :

$$\int_Y A(y) \sum_{i=1}^N \partial_{x_i} u_0(x) (\nabla_y w_i(y) + e_i) dy = \sum_{j=1}^N \left(\sum_{i=1}^N A_{ji}^* (\nabla u_0(x))_i \right) e_j.$$

Cette dernière égalité peut finalement s'écrire suivant :

$$\int_Y A(y) \sum_{i=1}^N \partial_{x_i} u_0(x) (\nabla_y w_i(y) + e_i) dy = A^* \nabla u_0(x),$$

où la matrice A^* , dite *matrice homogénéisée*, est définie par :

$$A_{ij}^* = \sum_{k=1}^N \int_Y A_{ik}(y) (\nabla_y w_j(y) + e_j)_k dy = \int_Y (A(y) (\nabla_y w_j(y) + e_j), e_i) dy. \quad (1.16)$$

Remarque 1.4.4 Une fois le problème (1.13) résolu, l'Eq. (1.16) nous donne la règle de construction de la matrice homogénéisée, qui ne dépend pas ici du point macroscopique x . Dans des cas de structures hétérogènes plus complexes, où la matrice de conductivité A évoluerait suivant une dépendance du type $A(x, \frac{x}{\varepsilon})$, il faudrait résoudre un problème de cellule (1.13) en chaque point macroscopique, pour construire ensuite une matrice homogénéisée $A^*(x)$ variable en espace (à l'échelle macroscopique).

1.5 Structure du modèle homogénéisé

En revenant à l'équation sur u_0 (1.15), on aboutit à l'écriture du problème homogénéisé :

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(A^* \nabla u_0) = f & \text{dans } \Omega, \\ u_0 = 0 & \text{sur } \partial\Omega. \end{cases} \quad (1.17)$$

Le problème (1.17) évolue sur l'échelle macroscopique x , l'effet de l'échelle microscopique étant contenu dans la matrice A^* .

La stratégie de résolution du problème de départ (1.17) est donc la suivante :

- On commence par résoudre les N problèmes de cellule (1.13) (N étant la dimension du problème de conductivité considéré) donnant les fonctions w_i . Remarquons que ces problèmes de cellule ne dépendent que de la matrice de conductivité A . En particulier, ils ne dépendent pas de la donnée f . Ces problèmes de cellule sont définis sur la cellule de périodicité Y correspondant à l'échelle microscopique ε que l'on a dilatée.
- A partir des w_i ainsi obtenues, on construit la matrice A^* suivant (1.16).
- On résout le problème homogénéisé (1.17) à partir de la matrice A^* précédemment construite. Ce problème évoluant à l'échelle macroscopique, la résolution numérique ne nécessite pas de prendre un pas en maillage particulièrement fin.
- On obtient ainsi u_0 . A partir de u_0 et des fonctions w_i obtenues par résolution des problèmes de cellule, on peut calculer l'ordre suivant u_1 en appliquant (1.12).

- Si l'on désire connaître l'ordre suivant du développement u_2 , on peut résoudre (1.14) connaissant u_0, u_1 .

Le couplage entre échelle se fait donc par l'intermédiaire des problèmes de cellule (1.13) qui encodent les informations relatives à l'échelle microscopique. La règle de construction (1.16) de la matrice homogénéisée A^* (ici constante en espace) nous permet de remonter l'information à l'échelle macroscopique (voir Fig.1.2).

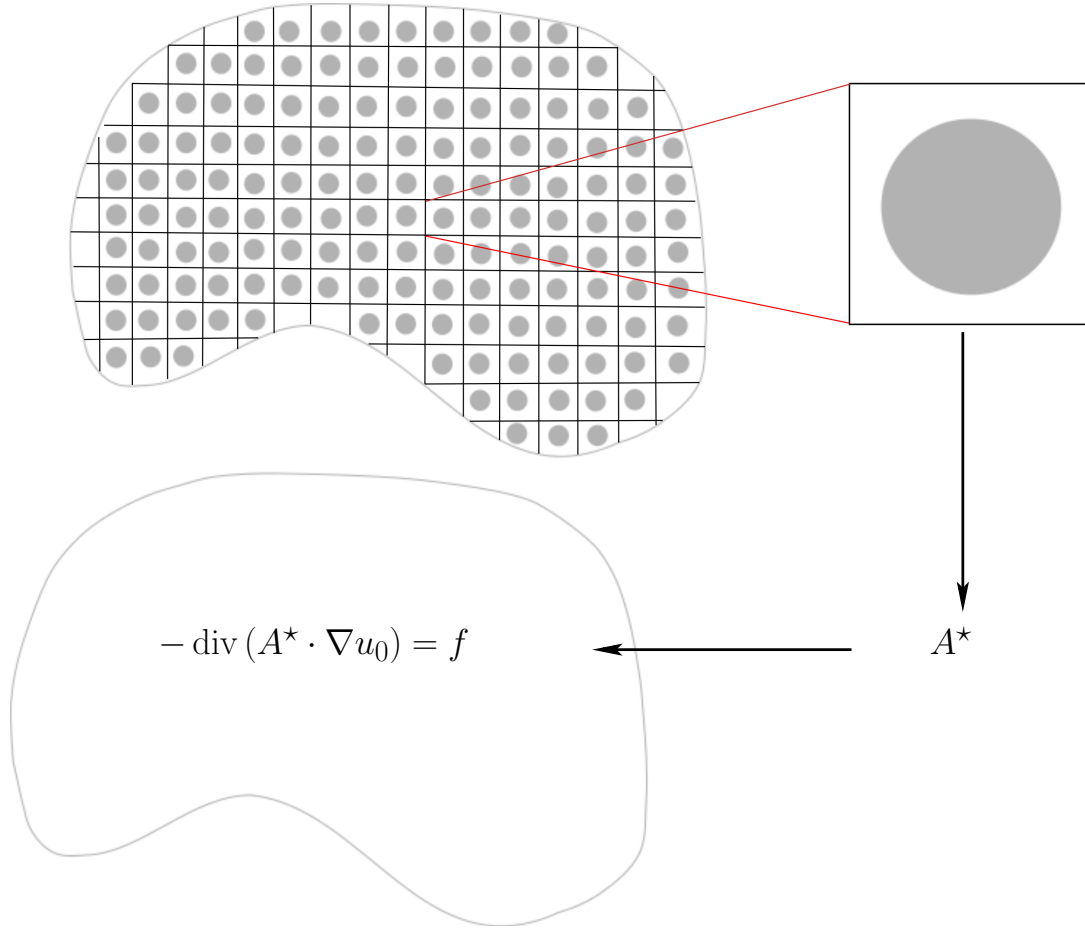


FIGURE 1.2 – Structure du problème homogénéisé pour le problème de la conductivité posé dans un matériau multi-échelle périodique.

Il n'est ainsi plus nécessaire de discrétiser le domaine avec un pas au moins aussi fin que l'échelle microscopique ε . L'approche homogénéisée consiste plutôt à résoudre au préalable les N problèmes de cellules, cette étape étant un précalcul permettant de construire la matrice homogénéisée A^* . La matrice homogénéisée est finalement injectée dans un calcul effectué à l'échelle macroscopique, avec un maillage relativement grossier qui n'a plus besoin de résoudre l'échelle fine.

On peut ainsi estimer le gain en coût calcul de l'approche par homogénéisation par rapport à la résolution directe. L'approche par homogénéisation permet d'obtenir une bonne approximation de la solution du problème initial (1.2), valable pour ε petit. L'approximation u_0 se calcule en résolvant le problème (1.17) pour lequel il n'est pas nécessaire de

discrétiser le domaine initial avec un pas au moins aussi fin que ε . Néanmoins, l'obtention du modèle homogénéisé nécessite a priori la résolution de N_{macro} problèmes de cellule du type (1.13), puisqu'en toute généralité, ce problème dépend du point x macroscopique. N_{macro} désigne ici le nombre de mailles nécessaires pour discrétiser le domaine avec un pas macroscopique, pouvant être grand devant ε . Une fois le problème de cellule résolu, il faut encore construire la matrice homogénéisée $A^*(x)$ selon (1.16), en répétant le processus dans chaque maille du domaine maillé à une échelle macroscopique. On peut enfin résoudre le problème homogénéisé. La complexité de la technique de résolution par homogénéisation est de l'ordre de $N_{macro} * N_h + 1$ où N_h correspond au coût de la construction de la matrice homogénéisée en un point. En outre, le coût calcul de l'approche directe est donné par $N_{micro} \sim \frac{D}{\varepsilon}$, où D est la taille caractéristique du domaine de calcul. N_{micro} tendant vers l'infini lorsque ε tend vers 0, l'approche par homogénéisation devient vite beaucoup plus efficace que la résolution directe du problème (qui n'est d'ailleurs pas toujours possible lorsque le nombre de mailles nécessaires devient vraiment trop grand, par exemple dès que $N_{micro} \sim 10^9$ mailles.)

Remarque 1.5.1 *Remarquons que ce que nous avons obtenu à la limite prend en fait la forme d'une hiérarchie d'équations :*

- u_0 s'exprime en fonction de la donnée f et de la matrice homogénéisée A^* , suivant (1.17)
- u_1 est liée à u_0 par (1.11)
- u_2 est liée à u_0 et u_1 par (1.14)

1.6 Notion de correcteurs

Par souci d'exhaustivité, nous évoquons pour finir la notion importante de correcteurs concernant l'approximation des dérivées de la solution exacte. Là encore, nous insistons plutôt sur l'esprit des résultats, qui sont bien connus et dont les détails des démonstrations peuvent par exemple se trouver dans le traité [10]. Par souci de simplicité, nous considérons le cas de la dimension un.

On peut montrer que la convergence de la suite u_ε vers la solution du problème homogénéisé u_0 est forte dans $L^2(\Omega)$ mais faible dans H^1 . Intuitivement, ceci signifie que u_0 donne bien le comportement moyen de la solution exacte u_ε présentant des oscillations d'amplitude ε à l'échelle ε . En revanche, la dérivée de la solution homogénéisée u'_0 est une très mauvaise approximation de la dérivée de la solution microscopique u'_ε , cette dernière étant caractérisée par des oscillations d'amplitude 1. En d'autres termes, la suite $u'_\varepsilon - u'_0$ tend faiblement vers 0 dans L^2 et pas fortement. Il est possible de rendre *forte* la convergence de u'_ε vers u'_0 en rajoutant un terme d'ordre 1 en ε , appelé correcteur. On peut en effet montrer que, sous de bonnes conditions sur les données, le développement asymptotique tronqué à l'ordre 1 en ε : $u_\varepsilon - u_0 - \varepsilon u_1(\cdot, \frac{\cdot}{\varepsilon})$ tend effectivement vers 0 *fortement* dans H^1 .

Remarquons au passage que l'ordre de la convergence associée au développement asymptotique s'avère en générale plus faible que dans un développement limité classique.

Par exemple, dans le cas périodique de dimension un, on peut montrer que :

$$\|u_\varepsilon(x) - \left(u_0(x) + \varepsilon u'_0 w\left(\frac{x}{\varepsilon}\right)\right)\|_{H^1} = \mathcal{O}(\varepsilon) \quad (1.18)$$

où w est la solution du problème de cellule 1D :

$$\begin{cases} -\frac{d}{dy} \left(a(y) \left(1 + \frac{dw}{dy}(y) \right) \right) = 0 \text{ dans } [0, 1] \\ w \text{ périodique de période } 1. \end{cases} \quad (1.19)$$

Dans un développement limité classique, les différences de type $v_\varepsilon - v_0 - \varepsilon v_1$ sont habituellement d'ordre $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$ ou au moins $o(\varepsilon)$.

Ceci tient au fait que dans la dérivée du développement asymptotique :

$$\left(u_0(x) + \varepsilon u'_0(x) w\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) \right)' = u'_0(x) + u'_0(x) w'\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) + \varepsilon u''_0(x) w\left(\frac{x}{\varepsilon}\right),$$

le terme $\varepsilon u''_0(x) w\left(\frac{x}{\varepsilon}\right)$ en apparence d'ordre 1 en ε cache en fait un terme d'ordre 0 du fait de l'argument en x/ε dans la fonction w .

On n'a donc ici qu'une approximation d'ordre $\mathcal{O}(\varepsilon)$ dans le cas 1D, cela devenant encore moins bon (tout en restant d'ordre $o(\varepsilon)$) dans les situations plus générales pour lesquelles la prise en compte d'un correcteur permet de construire une approximation typiquement d'ordre $\mathcal{O}(\sqrt{\varepsilon})$ [10]. Ceci est en fait lié à une difficulté liée à l'application des conditions limites au correcteurs, qui ne vérifient pas nécessairement les conditions limites imposées sur la solution exacte u_ε . Il s'en suit que la convergence sur le bord n'est pas très bonne. Or, les propriétés de l'opérateur Trace² [17] sont telles que la norme $H^1(\Omega)$ majore (à une constante multiplicative près) la norme $L^2(\partial\Omega)$. Ainsi, la mauvaise convergence sur le bord a en fait des répercussions sur *tout* le domaine.

2. Nous verrons une application des théorèmes de trace pour traiter des convergences sur le bord dans le chapitre 3

2

Cas de la diffusion en milieu fissuré : formulation du modèle homogénéisé

Sommaire

2.1	Introduction	35
2.2	Présentation du problème et motivation	36
2.2.1	Géométrie	36
2.2.2	Conditions limites	36
2.2.3	Motivation	36
2.2.4	Problèmes similaires en homogénéisation	37
2.3	Formulation du problème exact	39
2.4	Développement asymptotique à deux échelles	39
2.5	Analyse de la couche limite en pointe de fissure	41
2.6	Equation limite homogénéisée	45
2.7	Analyse du problème homogénéisé	47

2.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous exposons en détail le problème de diffusion de la chaleur en milieu fissuré pour lequel on élabore une approche de type homogénéisation, dont l'esprit suit d'assez près les développements rappelés au chapitre précédent sur l'exemple de la conductivité linéaire d'un matériau composite.

On commence par rappeler la problématique générale, et les motivations de l'étude. Dans un souci de replacer les résultats établis dans le champs de l'homogénéisation, on évoque également certains problèmes similaires déjà traités dans la littérature par une approche semblable.

Ensuite, après avoir présenté la géométrie multi-échelle du problème et la forme du problème aux limites, on effectue un développement asymptotique de la solution du problème exact aboutissant à la formulation du modèle homogénéisé. Un effet de couche

limite au bord de la fissure est également analysé par développement asymptotique. Le caractère bien posé du modèle homogénéisé obtenu est finalement discuté.

Ce chapitre reprend la publication [P1] et une partie de [P2].

2.2 Présentation du problème et motivation

On considère la propagation de la chaleur dans un milieu fissuré supposé conducteur. La propagation est initiée par un flux d'énergie incident sur la partie fissurée du matériau (voir Fig.2.1 où l'on représente le flux d'énergie en traits pointillés).

2.2.1 Géométrie

Le domaine fissuré Ω_ε considéré (voir Fig.2.1) correspond à un agencement périodique (selon la direction spatiale y) de cellules élémentaires de largeur ε caractérisées par la présence d'une indentation représentant la fissure (voir Fig. 2.1). L'axe des fissures est pris suivant la direction x , perpendiculaire à la surface du matériau. Dans chaque cellule de taille ε , la largeur de la fissure est $\alpha\varepsilon$, α étant un paramètre fixé dans $[0, 1)$. Selon la direction x , le domaine Ω_ε est divisé en deux parties de longueur respective unité : la partie de gauche est fissurée tandis que la partie de droite est intègre. Les frontières du domaine microscopique Ω_ε , appelées $\Gamma_\varepsilon^0, \Gamma_\varepsilon^1, \Gamma_\varepsilon^\alpha, \Gamma_\varepsilon^\beta$ sont définies sur la Fig. 2.1. Le bord droit Γ_ε^0 coïncide avec l'ensemble $\{x = 1\}$, tandis que Γ_ε^β est un sous-ensemble de $\{x = 0\}$. Le bord gauche Γ_ε^1 est un sous-ensemble de $\{x = -1\}$. La période $\varepsilon > 0$ et supposée être petite et tendre vers 0, tandis que le paramètre $\alpha \in [0, 1)$ est fixée et pilote la largeur des fissures.

2.2.2 Conditions limites

La structure périodique fissurée est soumise à un flux d'énergie incident engendrant un processus de diffusion au sein du milieu. Le paramètre $\beta \in [0, \alpha)$ mesure la proportion du flux incident qui, appliqué à la frontière $\{x = -1, -\alpha\varepsilon/2 < y < \alpha\varepsilon/2\}$, atteint le fond de la fissure Γ_ε^β . La part restante du flux incident est redistribuée sur les bords horizontaux de l'indentation, nommées $\Gamma_\varepsilon^\alpha$. Le paramètre β est supposé fixé. La condition limite imposée est ainsi telle que le flux total éclairant le côté fissuré soit exactement 1, ce qui correspond à la valeur du flux que l'on impose dans le cas $\alpha = 0$ (milieu intègre). Une dépendance spatio-temporelle du flux appliqué sur le bord horizontal $\Gamma_\varepsilon^\alpha$ peut être prise en compte sans que cela ne change le processus d'homogénéisation que l'on décrit ici.

2.2.3 Motivation

Physiquement, dans le cas d'un processus de diffusion d'énergie, les fissures augmentent la surface d'échange entre le milieu fissuré et la source d'énergie représentée par le flux incident. Elles peuvent ainsi perturber significativement le bilan énergétique du système. Dans de nombreuses situations, la complexité des fissures est telle que l'on ne peut aborder le problème par une simulation directe, en particulier lorsque la période du domaine fissuré

ε tend vers 0. En dessous d'un certain seuil, on ne pourra même plus mailler le domaine. L'approche directe pour appliquer par une méthode de type éléments finis se révèle donc vite inextricable. On cherche donc à effectuer un pré-traitement du système multi-échelle afin de faire disparaître la petite échelle et en déduire une modélisation homogénéisée ne contenant plus que la grande échelle de variation du problème. En d'autres termes, on cherche à approcher de façon *moyenne* l'effet des fissures sur le processus de diffusion observé à l'échelle macroscopique.

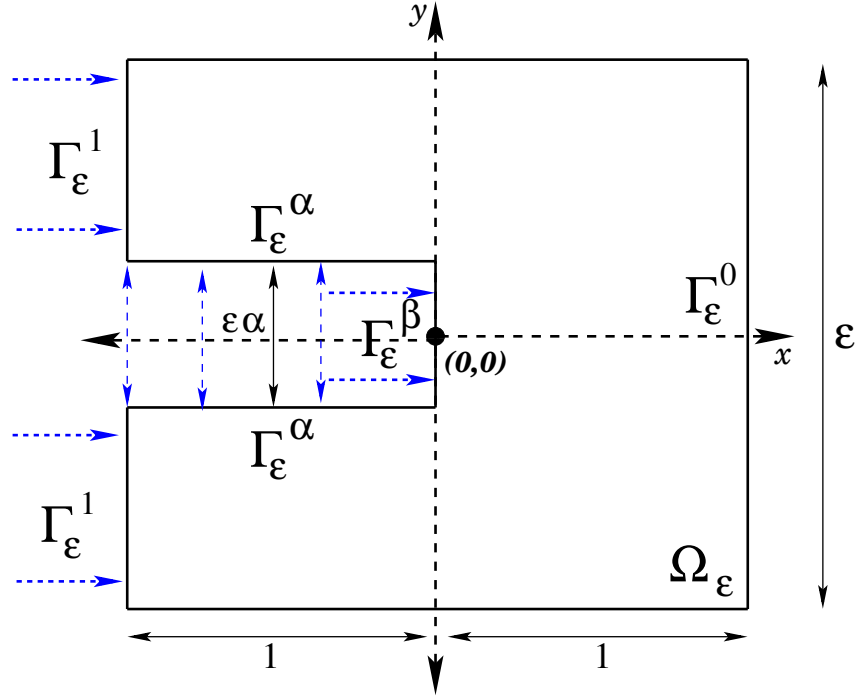


FIGURE 2.1 – Le domaine fissuré Ω_ε .

Le domaine est y -périodique de période ε . La largeur de la fissure est $\alpha\varepsilon$. Le flux incident est représenté en traits pointillés bleus. Une partie du flux atteint le bord vertical Γ_ε^β de la fissure. Une autre proportion attaque les bords horizontaux $\Gamma_\varepsilon^\alpha$.

2.2.4 Problèmes similaires en homogénéisation

"Un terme étrange venu d'ailleurs"

Il s'agit de la référence [11] de D. Cioranescu et F. Murat. Un problème 2D de type elliptique est considéré dans un domaine périodique *perforé* Ω_ε . La cellule périodique est de taille ε et contient en son sein un trou centré de taille $(\varepsilon^\alpha, \alpha > 1)$. La formulation du problème aux limites est ainsi la suivante :

$$\begin{cases} -\Delta u_\varepsilon = f & \text{dans } \Omega_\varepsilon \\ \partial_n u_\varepsilon = 0 & \text{sur le bord des trous ,} \\ u = 0 & \text{sur } \partial\Omega_\varepsilon \end{cases} \quad (2.1)$$

Les conditions aux limites sont donc de type Neumann au bord des trous et de type Dirichlet au bord du grand domaine. f est un terme source donné supposé régulier sur le domaine perforé Ω_ε .

Remarque 2.2.1 *Le modèle microscopique (2.1) dépend de ε au travers du domaine Ω_ε sur lequel il est posé. L'équation modèle n'en dépend pas. Cette situation, que l'on retrouve dans notre problème de diffusion en milieux fissuré, diffère quelque peu du problème de la conductivité linéaire présenté au chapitre 1, où la dépendance en ε était présente au sein de l'équation du modèle exact (dans les coefficients de la matrice de conductivité) et non dans le domaine de calcul Ω .*

Le problème limite obtenu lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$ est alors de la forme suivante :

$$\begin{cases} -\Delta u_\varepsilon + K(\alpha)u = f & \text{dans } \Omega \\ u = 0 & \text{sur } \partial\Omega \end{cases} \quad (2.2)$$

où Ω est le domaine homogénéisé ne contenant plus la description des trous.

La forme du problème limite est encore elliptique mais avec un terme supplémentaire dépendant du paramètre pilotant la taille des trous. Ce "terme étrange" est en fait issu du processus d'homogénéisation.

Nous verrons que le modèle obtenu pour notre problème de diffusion, bien que de nature différente, présente des similarités. En particulier, nous montrerons que le modèle limite est encore un modèle de type diffusion, mais avec un terme source supplémentaire défini dans le volume du milieu homogénéisé.

Autres problèmes

L'approche par homogénéisation a été appliquée à de nombreux problèmes physiques, plus ou moins proches du problème de diffusion en milieux fissurés que l'on cherche à résoudre : les auteurs de la réf. [2] établissent une condition limite effective pour l'équation stationnaire de Navier-Stokes. Le domaine est borné par une paroi rugueuse caractérisée par des oscillations, assez semblables au problème que l'on traite, mais pour lesquelles l'amplitude des oscillations (ce qui correspond, dans notre cas, à la profondeur de la fissure) est de taille ε , tandis que la profondeur de l'indentation est de taille 1 dans notre problème.

Un problème similaire est abordé dans [23].

[13] étudie aussi ce problème, mais dans le cas d'un domaine infini.

Dans [14], un modèle de type Stokes avec terme de Coriolis est étudié.

Le cas de l'écoulement de Couette est traité dans [24].

Des problèmes elliptiques sont considérés, dans des configurations assez proches de celle que l'on étudie, dans [8, 24, 30, 37]. Un problème de type Poisson est résolu dans [18], avec en particulier trois échelles de variation au niveau des conditions limites : 1, ε , ε^2 .

Le cas stochastique est abordé dans [5].

Dans les travaux [4, 6], les auteurs considèrent une géométrie semblable à celle que l'on traite. Le problème est de type Poisson, et la taille des indentations sur la frontière est 1. Néanmoins, la condition limite s'appliquant sur l'indentation est de type Dirichlet,

tandis que notre problème est posé avec des conditions aux limites de type Neumann (flux imposé).

2.3 Formulation du problème exact

Le problème de diffusion que l'on cherche à résoudre dans le domaine fissuré y -périodique est le suivant :

$$\begin{cases} \partial_t u_\varepsilon - \Delta u_\varepsilon = 0 & \text{dans } \Omega_\varepsilon, \\ \partial_n u_\varepsilon = 0 & \text{sur } \Gamma_\varepsilon^0, \\ \partial_n u_\varepsilon = 1 & \text{sur } \Gamma_\varepsilon^1, \\ \partial_n u_\varepsilon = \frac{\alpha-\beta}{2} \varepsilon & \text{sur } \Gamma_\varepsilon^\alpha, \\ \partial_n u_\varepsilon = \frac{\beta}{\alpha} & \text{sur } \Gamma_\varepsilon^\beta. \end{cases} \quad (2.3)$$

assorti d'une condition initiale :

$$u_\varepsilon(x, y, t = 0) = u^0(x, y), \quad (2.4)$$

afin que la problème soit bien posé et admette une unique solution.

L'unique solution $u_\varepsilon(x, y, t)$ du problème exact est ainsi y -périodique de période ε .

2.4 Développement asymptotique à deux échelles

Comme dans le problème de la conductivité, nous commençons par effectuer un développement asymptotique formel de la solution u_ε du problème (2.3) en puissance de ε . Cette démarche correspond à une manière très générale d'aborder un problème multi-échelle et est particulièrement bien adaptée au cas périodique considéré ici, comme le témoignent les nombreux résultats issus de cette approche [40], [41], [26], [7]. On la retrouvera d'ailleurs en filigrane des différents problèmes multi-échelles traités dans le manuscrit. Cette première phase revient en fait à raisonner par conditions nécessaires afin d'obtenir la forme de l'équation limite. Pour démontrer que l'équation limite est effectivement la bonne limite du problème, il est nécessaire d'effectuer la preuve de convergence (qui sera exposée en détail au chapitre 3).

On commence par définir une mise à l'échelle de la solution $u_\varepsilon(x, y, t)$ par rapport à la variable spatiale y , qui est la direction suivant laquelle l'échelle microscopique se manifeste. On dilate alors en y la solution $u_\varepsilon(x, y, t)$ en définissant :

$$u_\varepsilon(x, y, t) = v_\varepsilon\left(x, \frac{y}{\varepsilon}, t\right). \quad (2.5)$$

On passe ainsi de la fonction $u_\varepsilon(x, y, t)$ ε -périodique en y à la fonction v_ε 1-périodique en y . Ecrivons alors le problème aux limites sur v_ε . En appliquant le changement de variable $y \longrightarrow \frac{y}{\varepsilon}$, on a :

$$\partial_x u_\varepsilon(x, y, t) = \partial_x v_\varepsilon\left(x, \frac{y}{\varepsilon}, t\right), \quad \partial_x^2 u_\varepsilon(x, y, t) = \partial_x^2 v_\varepsilon\left(x, \frac{y}{\varepsilon}, t\right),$$

$$\partial_y u_\varepsilon(x, y, t) = \frac{1}{\varepsilon} \partial_y v_\varepsilon\left(x, \frac{y}{\varepsilon}, t\right), \quad \partial_y^2 u_\varepsilon(x, y, t) = \frac{1}{\varepsilon^2} \partial_y^2 v_\varepsilon\left(x, \frac{y}{\varepsilon}, t\right).$$

La formulation du problème (2.3) écrite sur v_ε est alors :

$$\begin{cases} -\partial_x^2 v_\varepsilon - \frac{1}{\varepsilon^2} \partial_y^2 v_\varepsilon + \partial_t v_\varepsilon = 0 & \text{dans } \Omega_1, \\ \partial_n v_\varepsilon = 0 & \text{sur } \Gamma_1^0, \\ \partial_n v_\varepsilon = 1 & \text{sur } \Gamma_1^1, \\ \frac{1}{\varepsilon^2} \partial_n v_\varepsilon = \frac{\alpha - \beta}{2} & \text{sur } \Gamma_1^\alpha, \\ \partial_n v_\varepsilon = \frac{\beta}{\alpha} & \text{sur } \Gamma_1^\beta \end{cases} \quad (2.6)$$

Nous remarquons alors que le problème (2.6) évolue dans le domaine Ω_1 qui ne dépend plus de ε . Nous avons ainsi à étudier une équation dépendant de ε dans un domaine fixé. En outre, le paramètre ε n'apparaît dans l'équation (2.6) que sous la forme ε^2 , ce qui signifie que ε^2 est un paramètre pertinent pour effectuer le développement asymptotique. Il semble ainsi naturel de rechercher une solution v_ε du problème (2.6) sous la forme :

$$v_\varepsilon(x, y, t) = v_0(x, y, t) + \varepsilon^2 v_1(x, y, t) + \varepsilon^4 v_2(x, y, t) + \dots \quad (2.7)$$

Remarque 2.4.1 *Comme on le verra plus tard, une couche limite va se développer en $x = 0$. Il serait possible d'en tenir compte dès le début au niveau du développement asymptotique de v_ε en cherchant v_ε sous la forme :*

$$\begin{aligned} v_\varepsilon(x, y, t) &= v_0(x, y, t) + \varepsilon^2 v_1(x, y, t) + \varepsilon^4 v_2(x, y, t) + \dots \\ &\quad + v_{BL_0}\left(\frac{x}{\varepsilon}, y, t\right) + \varepsilon^2 v_{BL_1}\left(\frac{x}{\varepsilon}, y, t\right) + \dots \end{aligned} \quad (2.8)$$

Néanmoins, pour simplifier la présentation, nous traiterons l'effet de couche-limite séparément et nous considérons le développement (2.7) pour trouver la forme du problème homogénéisé.

Nous injectons alors le développement asymptotique (2.7) dans le système (2.6) et nous identifions les différentes puissances de ε^2 . Ce procédé fait ainsi apparaître la cascade d'équations suivante :

– A l'ordre ε^{-2} :

$$\partial_y^2 v_0 = 0,$$

ce qui signifie que v_0 peut s'écrire

$$v_0(x, y, t) = f(x, t) + yg(x, t),$$

où f et g sont deux fonctions indépendantes de la variable y .

Aussi, la condition de périodicité en y vérifiée par v_ε implique que $v_0(x, 1/2, t) = v_0(x, -1/2, t)$, d'où $g = 0$. Ainsi, v_0 ne dépend pas de y :

$$v_0(x, y, t) = v_0(x, t). \quad (2.9)$$

Les conditions limites sur v_0 sont :

$$\partial_n v_0 = 0 \text{ sur } \Gamma_1^0, \quad \partial_n v_0 = 1 \text{ sur } \Gamma_1^1, \quad \partial_n v_0 = 0 \text{ sur } \Gamma_1^\alpha, \quad \partial_n v_0 = \frac{\beta}{\alpha} \text{ sur } \Gamma_1^\beta. \quad (2.10)$$

On vérifie que la condition limite sur Γ_1^α est bien cohérente avec (2.9). Cette condition est en effet équivalente à : $\partial_y v_0 = 0$ sur Γ_1^α , qui est automatiquement vérifiée comme v_0 ne dépend pas de y .

– A l'ordre ε^0 :

$$-\partial_x^2 v_0 - \partial_y^2 v_1 + \partial_t v_0 = 0. \quad (2.11)$$

Les conditions limites vérifiées par v_1 sont

$$\partial_n v_1 = 0 \text{ sur } \Gamma_1^0, \quad \partial_n v_1 = 0 \text{ sur } \Gamma_1^1, \quad \partial_n v_1 = \frac{\alpha - \beta}{2} \text{ sur } \Gamma_1^\alpha, \quad \partial_n v_1 = 0 \text{ sur } \Gamma_1^\beta.$$

On intègre maintenant (2.11) par rapport à la variable y . On obtient alors une équation correspondant au sous-domaine contenant la fissure (c'est à dire pour $x < 0$) et une autre pour la partie intègre ($x > 0$).

Pour $x < 0$ (partie fissurée), l'intégration de (2.11) selon y donne :

$$-(1 - \alpha)\partial_x^2 v_0 + (1 - \alpha)\partial_t v_0 = \int_{-\frac{1}{2}}^{-\frac{\alpha}{2}} \partial_y^2 v_1 dy + \int_{\frac{\alpha}{2}}^{\frac{1}{2}} \partial_y^2 v_1 dy. \quad (2.12)$$

Pour $x > 0$ (partie intègre), l'intégration en y conduit à :

$$-\partial_x^2 v_0 + \partial_t v_0 = \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \partial_y^2 v_1 dy. \quad (2.13)$$

Pour évaluer l'intégrale dans zone fissurée ($x < 0$), correspondant à (2.12), nous utilisons la condition limite donnant la valeur du flux $\partial_n v_1$ sur les parties horizontales de la fissure (bord Γ_1^α) :

$$\partial_y v_1 \left(x, -\frac{\alpha}{2}, t \right) = \frac{\alpha - \beta}{2}, \quad \partial_y v_1 \left(x, \frac{\alpha}{2}, t \right) = -\frac{\alpha - \beta}{2}.$$

En outre, la périodicité en y implique que la valeur au bord de v en $y = 1/2$ est exactement compensée par celle en $y = -1/2$. Ainsi, le membre droite de l'équation (2.12) est $\frac{\alpha - \beta}{2} + \frac{\alpha - \beta}{2} = \alpha - \beta$. On obtient finalement :

$$\begin{cases} -(1 - \alpha)\partial_x^2 v_0 + (1 - \alpha)\partial_t v_0 = \alpha - \beta & \text{si } x < 0, \\ -\partial_x^2 v_0 + \partial_t v_0 = 0 & \text{si } x > 0. \end{cases}$$

2.5 Analyse de la couche limite en pointe de fissure

v_0 vérifie deux équations distinctes, selon que $\{x < 0\}$ ou $\{x > 0\}$. Afin que le problème aux limites sur v_0 soit bien posé, nous devons expliciter les conditions limites.

Pour les bords Γ_1^0 et Γ_1^1 , on peut appliquer (2.10).

Nous allons maintenant écrire la condition limite à l'interface $\{x = 0\}$.

Comme on a supposé que $\partial_n u = \beta/\alpha$ sur Γ_1^β (fond vertical de la fissure en $x = 0$), et comme v_0 ne dépend pas de y , il semblerait naturel d'imposer $\partial_x v_0(x = 0) = -\beta/\alpha$. Néanmoins, comme on le montre ci-dessous, le flux $\partial_x v_0$ n'est en fait pas continu à l'interface $\{x = 0\}$. Comme annoncé précédemment dans la remarque 2.4.1, il est en fait nécessaire d'introduire une *couche limite* à cet endroit. Pour ce faire, nous revenons à (2.6), dans laquelle nous "zoomons" autour de $x = 0$, en définissant :

$$v_\varepsilon(x, y, t) = w_\varepsilon\left(\frac{x}{\varepsilon}, y, t\right). \quad (2.14)$$

On met ainsi à l'échelle la fonction v par rapport à la variable x autour de 0 : dans le membre de gauche de (2.14), x varie autour de 0 dans un petit domaine de taille ε (considéré comme un petit paramètre que l'on fait tendre vers 0), de sorte que la fonction $w(\cdot, y, t)$ varie par rapport à sa première variable sur un domaine dilaté de taille 1.

En considérant la mise à l'échelle (2.14) dans (2.6), et en utilisant :

$$\partial_x^2 v_\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon^2} \partial_x^2 w_\varepsilon, \quad \partial_y^2 v_\varepsilon = \partial_y^2 w_\varepsilon$$

on obtient :

$$-\partial_x^2 w_\varepsilon - \partial_y^2 w_\varepsilon + \varepsilon^2 \partial_t w_\varepsilon = 0. \quad (2.15)$$

Intégrons alors l'équation (2.15) sur le domaine $A_\delta = [-\delta, \delta] \times [-1/2, 1/2] \cap \Omega_1$ (voir figure 2.2).

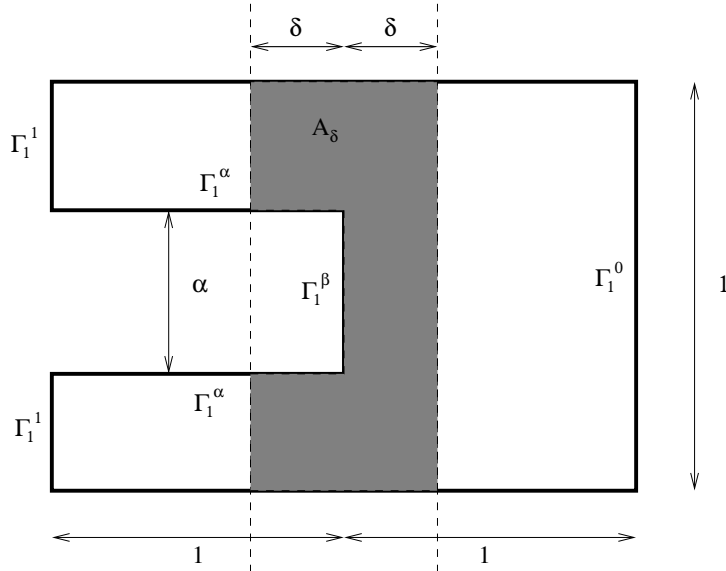


FIGURE 2.2 – Le domaine A_δ associé à la couche limite en $\{x = 0\}$.

On multiplie (2.15) par la fonction test $\phi = 1$ et on intègre sur A_δ . On utilise pour cela la formule de Green (généralisant l'intégration par parties) :

$$\int_{A_\delta} (\nabla \phi \cdot \nabla w + \phi \Delta w) dx dy = \int_{\partial A_\delta} \partial_n w \phi d\gamma, \quad (2.16)$$

valable pour toute fonction test ϕ suffisamment régulière.

On obtient :

$$\begin{aligned} \int_{\{x=\delta\}} \partial_x w_\varepsilon - \int_{\{x=-\delta, \alpha/2 < |y| < 1/2\}} \partial_x w_\varepsilon - \int_{\{x=0, |y| < \alpha/2\}} \partial_x w_\varepsilon \\ - \int_{\{y=\alpha/2, -\delta < x < 0\}} \partial_y w_\varepsilon + \int_{\{y=-\alpha/2, -\delta < x < 0\}} \partial_y w_\varepsilon = \varepsilon^2 \int_{A_\delta} \partial_t w_\varepsilon \end{aligned} \quad (2.17)$$

Analysons l'ordre de grandeur des termes de l'équation (2.17) :

- les deux derniers termes du membre de gauche $\int_{\{y=\alpha/2, -\delta < x < 0\}} \partial_y w_\varepsilon$ et $\int_{\{y=-\alpha/2, -\delta < x < 0\}} \partial_y w_\varepsilon$ sont d'ordre $\mathcal{O}(\delta)$.
- Le membre droite de (2.17) est en $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$.
- Enfin, $\int_{\{x=0, |y| < \alpha/2\}} \partial_x w_\varepsilon = \beta \varepsilon$ d'après la condition limite imposée sur le bord Γ_1^β de la fissure, et sachant que $\partial_x v_\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon} \partial_x w_\varepsilon$.

En faisant alors tendre d'abord le paramètre ε vers 0, puis la largeur δ du domaine A_δ vers 0^+ , (2.17) devient :

$$\int_{\{x=0^+\}} \partial_x w_\varepsilon = \int_{\{x=0^-, \alpha/2 < |y| < 1/2\}} \partial_x w_\varepsilon - \beta \varepsilon.$$

c'est à dire :

$$\int_{\{x=0^+\}} \partial_x v_\varepsilon = \int_{\{x=0^-, \alpha/2 < |y| < 1/2\}} \partial_x v_\varepsilon - \beta.$$

A la limite $\varepsilon \rightarrow 0$, et en revenant à $v_0 \approx v_\varepsilon$, on a donc :

$$\partial_x v_0(0^+, y, t) = (1 - \alpha) \partial_x v_0(0^-, y, t) - \beta,$$

ou encore :

$$(1 - \alpha) \partial_x v_0(0^-, y, t) = \partial_x v_0(0^+, y, t) + \beta. \quad (2.18)$$

On a utilisé le fait que v_0 était indépendante de y , de sorte que les intégrales de v_0 par rapport à y se réduisent simplement à $(1 - \alpha)v_0$ (resp. v_0) pour $x < 0$ (resp. $x > 0$). A gauche de $x = 0$, le domaine est en effet fissuré de sorte que l'intégrale en y n'est effectuée que sur la partie intègre du matériau, de largeur $1 - \alpha$. La condition de transmission (2.18) traduit ainsi le fait que le flux n'est pas continu à la traversée de l'interface localisé en $\{x = 0\}$.

On peut de la même façon déduire une condition de transmission sur la valeur de la fonction v_0 en 0. Pour cela, nous revenons à (2.15) que l'on multiplie par la fonction test $\phi = x$. Nous obtenons :

$$-x \Delta w_\varepsilon + \varepsilon^2 x \partial_t w_\varepsilon = 0, \quad (2.19)$$

que l'on intègre alors comme précédemment sur le domaine A_δ .

La formule de Green (2.16) donne, avec $\phi = x$:

$$\int_{A_\delta} (\nabla w_\varepsilon + x \Delta w_\varepsilon) = \int_{\partial A_\delta} \partial_n w_\varepsilon x d\gamma,$$

L'intégrale de (2.19) peut alors s'écrire :

$$\begin{aligned} & \delta \int_{\{x=\delta\}} \partial_x w_\varepsilon + \delta \int_{\{x=-\delta, \alpha/2 < |y| < 1/2\}} \partial_x w_\varepsilon \\ & - \int_{\{y=\alpha/2, -\delta < x < 0\}} x \partial_y w_\varepsilon + \int_{\{y=-\alpha/2, -\delta < x < 0\}} x \partial_y w_\varepsilon \\ & = \varepsilon^2 \int_{A_\delta} x \partial_t w_\varepsilon + \int_{A_\delta} \partial_x w_\varepsilon \end{aligned} \quad (2.20)$$

Pour calculer l'intégrale de $\partial_x w_\varepsilon$, l'application du théorème de Fubini donne :

$$\int_{A_\delta} \partial_x w_\varepsilon = \int_{\{x=\delta\}} w_\varepsilon - \int_{\{x=-\delta, \alpha/2 < |y| < 1/2\}} w_\varepsilon - \int_{\{x=0, |y| < \alpha/2\}} w_\varepsilon$$

Revenant à (2.20), on obtient finalement :

$$\begin{aligned} & \delta \int_{\{x=\delta\}} \partial_x w_\varepsilon + \delta \int_{\{x=-\delta, \alpha/2 < |y| < 1/2\}} \partial_x w_\varepsilon \\ & - \int_{\{y=\alpha/2, -\delta < x < 0\}} x \partial_y w_\varepsilon + \int_{\{y=-\alpha/2, -\delta < x < 0\}} x \partial_y w_\varepsilon \\ & - \int_{\{x=\delta\}} w_\varepsilon + \int_{\{x=-\delta, \alpha/2 < |y| < 1/2\}} w_\varepsilon \\ & + \int_{\{x=0, |y| < \alpha/2\}} w_\varepsilon = \varepsilon^2 \int_{A_\delta} x \partial_t w_\varepsilon \end{aligned} \quad (2.21)$$

Comme précédemment, le membre droite de (2.21) en $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$ s'annule lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$, tandis que les termes en $\mathcal{O}(\delta)$ disparaissent lorsque l'on fait tendre δ vers 0. On obtient finalement :

$$\int_{\{x=0^+\}} w_\varepsilon = \int_{\{x=0^-, \alpha/2 < |y| < 1/2\}} w_\varepsilon + \int_{\{x=0, |y| < \alpha/2\}} w_\varepsilon. \quad (2.22)$$

Revenant à v_0 qui ne dépend pas de y , (2.22) signifie que v_0 est en fait continue à l'interface $x = 0$.

Rappelons qu'il s'agit ici d'une analyse formelle permettant de trouver la forme de la couche limite. Cette dernière sera analysée plus rigoureusement lors de la preuve de convergence (voir chapitre 3), où l'on montrera en particulier que les conditions de transmissions trouvées sont bien les bonnes.

Nous trouvons donc que le problème aux limites vérifié par v_0 est le suivant :

$$\begin{cases} -\partial_x^2 v_0 + \partial_t v_0 = \frac{\alpha-\beta}{1-\alpha} & \text{dans } \Omega_1 \cap \{x < 0\}, \\ \partial_n v_0 = 1 & \text{sur } \Gamma_1^1, \\ \partial_n v_0 = 0 & \text{sur } \Gamma_1^\alpha, \end{cases} \quad (2.23)$$

et

$$\begin{cases} -\partial_x^2 v_0 + \partial_t v_0 = 0 & \text{dans } \Omega_1 \cap \{x > 0\}, \\ \partial_n v_0 = 0 & \text{sur } \Gamma_1^0, \end{cases} \quad (2.24)$$

Pour que le problème soit bien posé, il est nécessaire de considérer les conditions de transmission à l'interface $\{x = 0\}$:

$$v_0(x = 0^-) = v_0(x = 0^+), \quad (1 - \alpha)\partial_x v_0(x = 0^-) = \partial_x v_0(x = 0^+) + \beta. \quad (2.25)$$

2.6 Equation limite homogénéisée

Nous avons montré formellement que la solution du problème multi-échelle initial

$$u_\varepsilon(x, y, t)$$

pouvait être approchée par la solution

$$v_0(x)$$

du problème (2.23)-(2.24). De plus, si l'on définit une extension de u_ε à l'extérieur du domaine Ω_ε en prolongeant la fonction par 0 dans l'espace de la fissure, cela nous permettant de définir u_ε dans le domaine fixe Ω .

D'autre part, on rappelle que, pour toute fonction a dans L^∞ , supposée périodique de période 1, la suite de fonctions $a(\frac{\cdot}{\varepsilon})$ converge faiblement-* vers la fonction constante $\langle a \rangle = \int_0^1 a$, correspondant à la moyenne de a :

$$a\left(\frac{y}{\varepsilon}\right) \xrightarrow{*} \int_{-1/2}^{1/2} a(y) dy, \quad (2.26)$$

et ce, dans L^∞ .

Rappelons que la convergence faible-* signifie :

$$\int a\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) v(x) dx \longrightarrow \int_0^1 a \int v,$$

pour toute fonction test $v \in L^1(\mathbb{R})$.

Compte tenu du lien entre u_ε et v_0 , u_ε converge (au sens faible-*) vers la moyenne en y de v_0 (qui ne dépend pas de y), c'est à dire $(1 - \alpha)v_0$ si $x < 0$ (partie fissurée) ou v_0 si $x > 0$ (partie intègre).

La suite de fonctions u_ε solutions du problème multi-échelle ε -périodique converge donc (au sens faible-*) vers u solution de (2.23) multipliée par $(1 - \alpha)$ et (2.24). L'équation homogénéisée correspondant à notre problème de diffusion en milieu fissuré est donc :

$$\begin{cases} -\Delta u + \partial_t u = \alpha - \beta & \text{dans } \{-1 < x < 0\}, \\ \partial_n u = 1 - \alpha & \text{sur } \{x = -1\}, \\ u \text{ is } 1 - \text{périodique en } y. \end{cases} \quad (2.27)$$

$$\begin{cases} -\Delta u + \partial_t u = 0 & \text{dans } \{0 < x < 1\}, \\ \partial_n u = 0 & \text{sur } \{x = 1\}, \\ u \text{ est } 1 - \text{périodique en } y. \end{cases} \quad (2.28)$$

Nous avons également des conditions de transmission héritées de (2.25) :

$$u(x = 0^-) = (1 - \alpha)u(x = 0^+), \quad \partial_x u(x = 0^-) = \partial_x u(x = 0^+) + \beta. \quad (2.29)$$

Eq. (2.27)-(2.28)-(2.29) forment le modèle homogénéisé. La solution u du problème homogénéisé évolue ainsi dans le domaine $\Omega = \Omega^+ \cup \Omega^-$ de taille $(2, 1)$ et ne contenant plus la description des fissures (Fig.2.3).

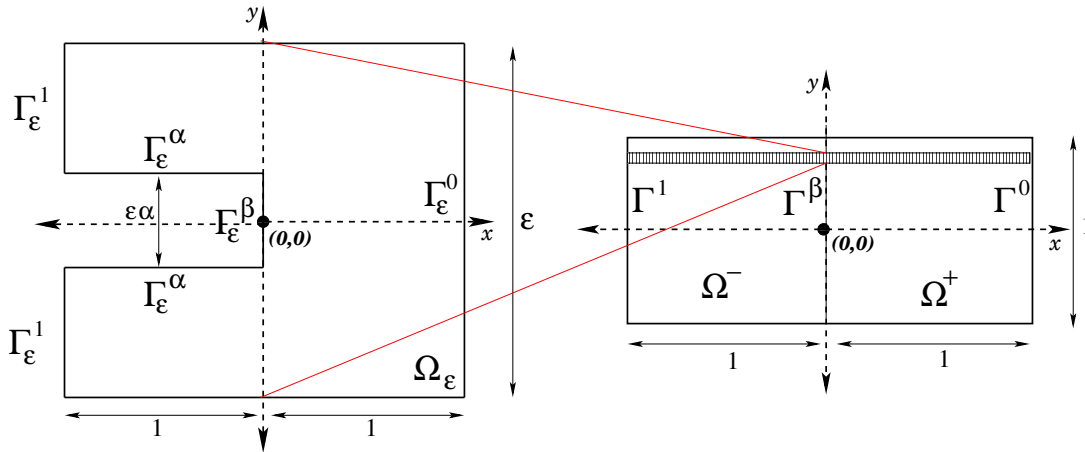


FIGURE 2.3 – Le domaine fissuré Ω_ε et le le domaine homogénéisé Ω .

La largeur de la bande hachurée correspond à la largeur ε du motif fissuré, replacée sur le domaine moyen Ω de largeur 1 et ne contenant plus la description directe des fissures.

Ceci donne une illustration du contraste entre l'échelle microscopique de la fissure et l'échelle macroscopique du domaine.

Remarque 2.6.1 Les conditions de couplage (2.29) sont caractérisées par un saut sur la solution u et sur la valeur du flux $\partial_x u$. Par conséquent, il n'est a priori pas possible d'écrire le système (2.27)-(2.28)-(2.29) sous la forme d'un seul problème aux limites posé sur tout le domaine $\{-1 < x < 1\}$.

Néanmoins, lorsque α est petit, et $\beta = 0$, les conditions de transmission (2.29) reviennent quasiment à imposer la continuité de u et de sa dérivée à travers l'interface

$\{x = 0\}$. Ainsi, dans une telle configuration, le problème approché

$$\begin{cases} -\Delta u + \partial_t u = \alpha \mathbf{1}_{\{x < 0\}} & \text{dans } \{-1 < x < 1\}, \\ \partial_n u = 1 - \alpha & \text{sur } \{x = -1\}, \\ \partial_n u = 0 & \text{sur } \{x = 1\}, \\ u \text{ est } 1 - \text{périodique en } y, \end{cases} \quad (2.30)$$

devrait donner une bonne estimation de la solution du problème homogénéisé complet (2.27)-(2.28)-(2.29).

Remarque 2.6.2 Une dépendance spatiale du flux sur le bord $\Gamma_\varepsilon^\alpha$ peut être prise en compte de manière naturelle. Considérant le cas $\beta = 0$ par souci de simplification, la formulation du problème exact sur le domaine fissuré Ω_ε s'écrit :

$$\begin{cases} \partial_t u - \Delta u = 0 & \text{dans } \Omega_\varepsilon, \\ \partial_n u = 0 & \text{sur } \Gamma_\varepsilon^0, \\ \partial_n u = 1 & \text{sur } \Gamma_\varepsilon^1, \\ \partial_n u = f_\alpha(x)\varepsilon & \text{sur } \Gamma_\varepsilon^\alpha, \\ \partial_n u = 0 & \text{sur } \Gamma_\varepsilon^\beta. \end{cases} \quad (2.31)$$

La fonction $f_\alpha(x)$ est telle que :

$$\int_{x=-1}^{x=0} f_\alpha(x) dx = \frac{\alpha}{2},$$

ce qui permet d'assurer la conservation de l'énergie lorsque ε varie.

De plus, si $f_\alpha(x)$ est telle que $f_\alpha(0) = 0$, alors la singularité en $x = 0$ disparaît et la formulation du modèle homogénéisé s'écrit :

$$\begin{cases} -\Delta u + \partial_t u = f_\alpha(x) \mathbf{1}_{\{x < 0\}} & \text{dans } \{-1 < x < 1\}, \\ \partial_n u = 1 - \alpha & \text{sur } \{x = -1\}, \\ \partial_n u = 0 & \text{sur } \{x = 1\}, \\ u \text{ est } 1 - \text{périodique en } y. \end{cases} \quad (2.32)$$

Dans une telle situation, la solution u et son gradient $\partial_n u$ sont continus à travers l'interface $x = 0$.

2.7 Analyse du problème homogénéisé

Dans cette section, on montre que le problème (2.27)-(2.28)-(2.29) est bien posé.

Introduisons tout d'abord les notations suivantes :

$$\Omega = \left\{ (x, y) \in \mathbb{R}^2, \quad -\frac{1}{2} < y < \frac{1}{2}, \quad -1 < x < 1 \right\}. \quad (2.33)$$

$$\Omega^+ = \Omega \cap \{x > 0\} = \left\{ (x, y) \in \mathbb{R}^2, \quad -\frac{1}{2} < y < \frac{1}{2}, \quad 0 < x < 1 \right\}. \quad (2.34)$$

$$\Omega^- = \Omega \cap \{x < 0\} = \left\{ (x, y) \in \mathbb{R}^2, \quad -\frac{1}{2} < y < \frac{1}{2}, \quad -1 < x < 0 \right\}. \quad (2.35)$$

$$\Gamma^1 = \left\{ (x, y) \in \mathbb{R}^2, \quad -\frac{1}{2} < y < \frac{1}{2}, \quad x = -1 \right\}. \quad (2.36)$$

$$\Gamma^0 = \left\{ (x, y) \in \mathbb{R}^2, \quad -\frac{1}{2} < y < \frac{1}{2}, \quad x = 1 \right\}. \quad (2.37)$$

$$\Gamma^\beta = \left\{ (x, y) \in \mathbb{R}^2, \quad -\frac{1}{2} < y < \frac{1}{2}, \quad x = 0 \right\}. \quad (2.38)$$

Lemme 2.7.1 *Supposons $\alpha \in (0, 1)$. Alors pour tout $T > 0$, le problème (2.27)-(2.28)-(2.29) admet une unique solution $(u_-, u_+) \in X$, où*

$$X = C([0, T], H^1(\Omega^-)) \cap C^1([0, T], L^2(\Omega^-)) \times C([0, T], H^1(\Omega^+)) \cap C^1([0, T], L^2(\Omega^+))$$

Preuve : Tout d'abord, remarquons que pour tout $F \in L^2(\Gamma^\beta)$, le problème

$$\begin{cases} -\Delta u + \partial_t u = 0 & \text{dans } \Omega^+, \\ \partial_n u = 0 & \text{sur } \Gamma^0, \\ \partial_n u = F & \text{sur } \Gamma^\beta, \\ u \text{ est } 1\text{-périodique en } y, \\ u(t = 0) = u_0 & \text{dans } \Omega^+. \end{cases} \quad (2.39)$$

admet bien une unique solution $u^+ \in C([0, T], H^1(\Omega^+)) \cap C^1([0, T], L^2(\Omega^+))$, pour tout $T > 0$. Cela se démontre en utilisant les outils standards d'analyse de problèmes aux limites de type parabolique. Nous renvoyons par exemple à [17] pour une analyse détaillée de la question.

On considère ensuite le problème (ici, $g \in L^2(\Gamma^\beta)$) :

$$\begin{cases} -\Delta u + \partial_t u = \alpha - \beta & \text{dans } \Omega^-, \\ \partial_n u = 1 - \alpha & \text{sur } \Gamma^1, \\ u = g & \text{sur } \Gamma^\beta, \\ u \text{ est } 1\text{-périodique en } y, \\ u(t = 0) = u_0 & \text{dans } \Omega^-. \end{cases} \quad (2.40)$$

Ici encore, la théorie standard des problèmes aux limites paraboliques s'applique naturellement pour montrer que (2.39) admet bien une unique solution $u^- \in C([0, T], H^1(\Omega^-)) \cap C^1([0, T], L^2(\Omega^-))$, pour tout $T > 0$ (voir [17]).

On étudie alors l'approche par point fixe suivante :

- On part d'une donnée initiale correspondant au flux $F^0 \in L^2(\Gamma^\beta)$, à laquelle on associe la solution $u^{+,0}$ de (2.39) sur Ω^+ .
- Ensuite, on définit g_0 comme étant la trace de $(1 - \alpha)u^{+,0}$ sur le bord Γ^β .

- On résout alors (2.40) dans le domaine Ω^- avec la donnée $g = g^0$ sur le bord Γ^β : cette étape définit alors la solution $u^{-,0}$, et une nouvelle valeur de flux $F^1 = \beta - \partial_n u^{-,0}$ dans $L^2(\Gamma^\beta)$.

En répétant cette procédure, on construit une suite de flux $(F^n)_{n \in \mathbb{N}}$ dans $L^2(\Gamma^\beta)$, ainsi qu'une suite de solutions correspondantes $u^{\pm,n}$ et une suite de données g^n . Pour montrer la convergence de la méthode, nous allons prouver que l'application $\Phi : L^2([0, T] \times \Gamma^\beta) \rightarrow L^2([0, T] \times \Gamma^\beta)$, qui associe F^{n+1} à F^n est contractante.

Pour ce faire, on définit

$$G^n = F^{n+1} - F^n, \quad v^{n,\pm} = u^{n+1,\pm} - u^{n,\pm}, \quad h^n = g^{n+1} - g^n.$$

Il est clair que $v^{n,+}$ vérifie (2.39) avec $F = G^n$ et $u_0 = 0$. De même, $v^{n,-}$ est solution de (2.40) avec $\alpha - \beta = 0$, $1 - \alpha = 0$, $u_0 = 0$, et $g = h^n$. Par unicité de la solution au problème (2.40), on a $v^{n,-}(x, y, t) = (1 - \alpha)v^{n,+}(-x, y, t)$, de là

$$G^{n+1} = (1 - \alpha)G^n. \tag{2.41}$$

Cela implique que la suite $(F^n)_{n \in \mathbb{N}}$ converge dans $L^2([0, T] \times \Gamma^\beta)$. Désignant par F sa limite, la solution correspondante u^\pm est par construction solution du problème (2.27)-(2.28)-(2.29), correspondant au modèle homogénéisé.

Cela démontre l'existence de la solution.

Pour démontrer l'unicité, on suppose que l'on a deux solutions u_1 et u_2 telles que $u_1 \neq u_2$. Nécessairement, on doit avoir $\partial_x u_1|_{\Gamma^\beta} \neq \partial_x u_2|_{\Gamma^\beta}$, conformément à l'unicité de la solution du problème (2.39). De là, en définissant $F_1 = \partial_x u_1|_{\Gamma^\beta}$ and $F_2 = \partial_x u_2|_{\Gamma^\beta}$, on construit deux fonctions qui sont des points fixes de l'application contractante Φ définie précédemment. Alors, nécessairement $F_1 = F_2$, ce qui prouve l'unicité de la solution du problème homogénéisé (2.27)-(2.28)-(2.29). \square

Remarque 2.7.2 *La preuve qui précède est en fait utile à des fins numériques. En effet, elle montre que l'approche par point fixe converge et fournit une méthode de construction de la solution. Ainsi, pour calculer numériquement la solution u du problème (2.27)-(2.28)-(2.29), on pourra reprendre une telle approche itérative. Notons toutefois que (2.41) est une égalité, de sorte que la convergence du point fixe peut être très lente lorsque α est proche de 0.*

Le problème direct contenant la description des fissures microscopique est donc remplacé par un modèle homogénéisé, ne contenant plus la description des fissures, dans lequel une partie de la condition limite est redistribuée sous la forme d'un terme source volumique au sein du milieu. Ce processus d'homogénéisation particulier justifie l'appellation du modèle homogénéisé dit MOSAIC (pour *Model of Sinks Averaging Inhomogeneous behaviour of Cracked structures*) que l'on utilisera dans la suite.

La forme du modèle homogénéisé apparaît plus simple que dans le cas du problème de la conductivité d'un matériau composite périodique, rappelé au chapitre 1. Ici, le problème de cellule est en quelque sorte "dégénéré", prenant la forme d'un terme source constant fonction du paramètre fixé α pilotant la largeur des fissures. Ce terme source

encode l'effet des fissures microscopiques sur le phénomène de diffusion observé au niveau macroscopique.

La structure du modèle homogénéisé est aussi particulière, en ce sens qu'elle ne peut s'exprimer sous la forme d'un unique problème aux limites posé sur l'ensemble du milieu homogénéisé. Cela est étroitement lié à la forme des fissures de type indentation qui induisent une couche limite autour du bord vertical³. Le modèle homogénéisé s'écrit donc sous la forme de deux sous problèmes connectés par des conditions de transmission sur la valeur de la solution et de son flux au voisinage du bord vertical des fissures. Une approche par point fixe fournit une preuve d'existence et d'unicité de la solution homogénéisée, et donne au passage une méthode de construction de la solution que l'on exploitera au chapitre 4 consacré à des illustrations numériques de la méthode.

3. On montrera en particulier au chapitre 5 traitant des extensions du modèle, que dans le cas de fissures en pointe, la couche limite disparaît.

3

Preuve de la convergence vers le modèle homogénéisé MOSAIC

Sommaire

3.1	Introduction	51
3.2	Enoncé de la proposition et remarques préliminaires	53
3.3	Lemmes techniques préliminaires	53
3.3.1	Une première estimation	54
3.3.2	Convergence faible dans $L^2(\Omega)$	54
3.3.3	Estimation du terme de bord sur $\Gamma_\varepsilon^\alpha$	56
3.3.4	Convergence sur les bords Γ^1 et Γ^0	57
3.3.5	Convergence sur le bord Γ^β	59
3.4	Preuve de convergence	61

3.1 Introduction

Le problème limite donné par (2.27)-(2.28)-(2.29) a été obtenu en raisonnant de manière nécessaire, à la base du développement en puissance de ε (2.7) postulé initialement. Le développement asymptotique et l'identification des différentes puissances de ε est ainsi une étape formelle du raisonnement qui permet d'établir la forme du problème homogénéisé. Il reste alors à préciser dans quel sens l'approximation de la solution par les fonctions u_0, u_1, u_2, \dots (que l'on sait maintenant calculer) est bonne et à s'assurer que les passages à la limite sont licites.

De façon générale en homogénéisation, plusieurs méthodes sont possibles pour élaborer une preuve de convergence :

- La méthode des fonctions test oscillantes, appelée aussi méthode d'énergie et mise au point par L.Tartar [45]. Cette méthode générale peut s'appliquer dans des contextes très généraux, sans préjuger de la nature périodique, stationnaire ou ergodique du milieu hétérogène considéré. L'idée principale de la méthode d'énergie est de remplacer les fonctions tests φ intervenant dans la formulation faible du problème aux limites exact, par

une suite de fonctions φ_ε qui converge faiblement de manière à pouvoir passer à la limite dans les produits de suites faiblement convergentes⁴ et en déduire la forme du problème limite. Pour illustrer le principe de la méthode sur un cas simple et instructif, reprenons la formulation variationnelle du problème de conductivité linéaire et périodique :

$$\int_{\Omega} A\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) \nabla u_\varepsilon(x) \cdot \nabla \varphi(x) dx = \int_{\Omega} f(x) \varphi(x) dx, \quad (3.1)$$

pour toute fonction test φ dans $H_0^1(\Omega)$.

Comme la suite u_ε vérifie l'estimation : $\|u_\varepsilon\|_{H_0^1(\Omega)} \leq C\|f\|_{L^2(\Omega)}$, on peut extraire une sous-suite (que l'on désigne encore par l'indice ε) u_ε qui converge faiblement vers une certaine fonction u dans $H_0^1(\Omega)$. Malheureusement, le membre de gauche de (3.1) implique le produit de deux suites faiblement convergentes dans $L^2(\Omega)$, à savoir $A(\frac{x}{\varepsilon})$ et $\nabla u_\varepsilon(x)$, et on ne peut rien dire a priori sur la limite du produit. Il n'est donc pas possible de passer à la limite dans les intégrales de (3.1). L'idée de la méthode d'énergie consiste alors à remplacer la fonction test fixée φ intervenant dans la formulation faible du problème (3.1) par une suite de fonctions test φ_ε (dites *fonctions test oscillantes*) qui convergent faiblement. La suite φ_ε est choisie de telle manière qu'il devienne possible de passer à la limite dans la formulation variationnelle (3.1). Il s'agit en fait d'un cas particulier de la théorie de "compacité par compensation" introduite par F. Murat et L. Tartar [34], [43].

- La convergence à deux échelles, qui s'appuie sur le développement asymptotique en lui donnant un sens topologique plus rigoureux. La notion de convergence à deux échelles a été introduite par G. Nguetseng [36] et développée par la suite par G. Allaire [3]. Elle permet de traiter la convergence d'intégrales du type :

$$\int_{\Omega} v_\varepsilon(x) \varphi\left(x, \frac{x}{\varepsilon}\right) dx,$$

où la suite v_ε est bornée dans $L^2(\Omega)$ et $\phi = \phi(x, y)$ est une fonction régulière et périodique par rapport à la variable y .

Dans notre cas particulier, nous pouvons faire une preuve directe de la convergence sans passer par ces outils théoriques généraux, permettant de traiter des cas plus complexes. Le principe de la preuve est de borner la solution u_ε du problème exact (2.3) indépendamment de ε , pour extraire une sous-suite convergent faiblement, cela permettant de passer à la limite dans les intégrales intervenant dans la formulation faible du modèle exact. Toutefois, les conditions de transmission liées à la couche limite au bord de la fissure en $x = 0$ induisent quelques complications dans le traitement des termes de bord. Pour cette raison, quelques lemmes techniques préliminaires, faisant notamment appel à des théorèmes de trace, sont nécessaires pour pouvoir développer la preuve complète.

4. Rappelons en effet qu'on ne peut *a priori* rien dire sur la convergence d'un produit de deux suites faiblement convergentes

3.2 Enoncé de la proposition et remarques préliminaires

Proposition 3.2.1 *Soit u_ε l'unique solution du problème (2.3). On prolonge u_ε par 0 à l'extérieur du domaine Ω_ε , et on suppose que la donnée initiale $u_\varepsilon(t = 0)$ est telle que*

$$u_\varepsilon(t = 0) \rightharpoonup u_0 \text{ dans } L^2(\Omega). \quad (3.2)$$

Alors, pour tout $T > 0$, on a

$$u_\varepsilon \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} u \text{ dans } L^2(\Omega \times [0, T]), \quad (3.3)$$

où u est l'unique solution du problème homogénéisé (2.27)-(2.28)-(2.29).

Remarque 3.2.2 *On a fixé $u_\varepsilon = 0$ en dehors de Ω_ε . Cette stratégie est conforme à l'intuition physique, en ce sens que u_ε représente une température, et que le transfert de chaleur n'est modélisé qu'à l'intérieur du domaine fissuré Ω_ε : l'extérieur correspond donc au vide, ou à un milieu complètement transparent au rayonnement.*

Remarque 3.2.3 *Dans (3.3), nous n'avons qu'une convergence au sens faible. Ceci tient au fait que l'on a prolongé la solution du problème exact u_ε par 0 à l'extérieur du domaine fissuré Ω_ε , comme expliqué dans la remarque 3.2.2, tandis que u_ε reste positive dans le domaine Ω_ε , en raison du flux incident imposé. Ainsi, la solution du problème exact u_ε se comporte qualitativement comme une fonction valant 1 dans Ω_ε , et 0 à l'extérieur. Dans le domaine Ω_1 , cette fonction discontinue converge faiblement vers sa moyenne, mais ne peut converger fortement dans L^2 .*

Remarque 3.2.4 *La convergence (3.3) est seulement locale en temps (T ne peut être infini). Ceci est lié au fait que l'on impose un flux incident constant. Par conséquent, en intégrant (2.3) sur le domaine fissuré Ω_ε , et en utilisant une intégration par parties, on a*

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega_\varepsilon} u = 1,$$

de sorte que u_ε ne peut être bornée par rapport à t .

3.3 Lemmes techniques préliminaires

Nous énonçons en les démontrant les différents lemmes techniques relatifs aux termes de bord du domaine fissuré et à la couche limite au voisinage du bord $x = 0$. Ces lemmes seront ensuite invoqués pour compléter la preuve de la convergence du modèle exact vers le modèle homogénéisé MOSAIC (tous deux écrits en formulation faible) lorsque la période des fissures ε tend vers 0.

3.3.1 Une première estimation

Lemme 3.3.1 *Sous les hypothèses de la proposition 3.2.1, pour tout $\varepsilon \in (0, 1)$, on a l'estimation suivante :*

$$\int_{\Gamma_\varepsilon^\beta} u_\varepsilon^2 + \int_{\Gamma_\varepsilon^0} u_\varepsilon^2 + \int_{\Gamma_\varepsilon^1} u_\varepsilon^2 + \varepsilon \int_{\Gamma_\varepsilon^\alpha} u_\varepsilon^2 \leq C \left(\int_{\Omega_\varepsilon} u_\varepsilon^2 + \int_{\Omega_\varepsilon} |\nabla u_\varepsilon|^2 \right), \quad (3.4)$$

où $C > 0$ ne dépend pas de ε .

Preuve : On emploie le changement d'échelle définie à la Section 2.4, en définissant

$$v(x, y) = u_\varepsilon(x, \varepsilon y). \quad (3.5)$$

Ensuite, le fait que $u_\varepsilon \in H^1(\Omega_\varepsilon)$ implique que $v \in H^1(\Omega_1)$. Sur le domaine Ω_1 fixe, indépendant de ε , on peut appliquer des théorèmes de trace standards [16, 19, 27] permettant de borner la norme L^2 sur la frontière par la norme H^1 dans le domaine. On en déduit qu'il existe une constante $C > 0$ ne dépendant que de α , telle que

$$\int_{\partial\Omega_1} v^2 \leq C \left(\int_{\Omega_1} v^2 + \int_{\Omega_1} |\nabla v|^2 \right).$$

Utilisant alors le lien entre v et u_ε défini par l'Eq.(3.5), on trouve que

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma_1^\beta} u_\varepsilon^2 + \int_{\Gamma_1^0} u_\varepsilon(x, \varepsilon y)^2 + \int_{\Gamma_1^1} u_\varepsilon(x, \varepsilon y)^2 + \int_{\Gamma_1^\alpha} u_\varepsilon(x, \varepsilon y)^2 &\leq C \int_{\Omega_1} u_\varepsilon(x, \varepsilon y)^2 \\ &\quad + C \int_{\Omega_1} \left(\frac{\partial u_\varepsilon}{\partial x}(x, \varepsilon y) \right)^2 + \varepsilon^2 \left(\frac{\partial u_\varepsilon}{\partial y}(x, \varepsilon y) \right)^2 \end{aligned}$$

Par changement de variable dans les intégrales, on arrive à :

$$\frac{1}{\varepsilon} \int_{\Gamma_\varepsilon^\beta} u_\varepsilon^2 + \frac{1}{\varepsilon} \int_{\Gamma_\varepsilon^0} u_\varepsilon^2 + \frac{1}{\varepsilon} \int_{\Gamma_\varepsilon^1} u_\varepsilon^2 + \int_{\Gamma_\varepsilon^\alpha} u_\varepsilon^2 \leq C \int_{\Omega_\varepsilon} \frac{1}{\varepsilon} u_\varepsilon^2 + \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{\partial u_\varepsilon}{\partial x} \right)^2 + \varepsilon \left(\frac{\partial u_\varepsilon}{\partial y} \right)^2,$$

ce qui prouve le résultat. \square

Remarque 3.3.2 *Dans la preuve qui précède, on n'utilise pas le fait que u_ε vérifie (2.3). Ainsi, le résultat du Lemme 3.3.1 s'applique en fait pour toutes fonctions $u_\varepsilon \in H^1(\Omega_\varepsilon)$.*

3.3.2 Convergence faible dans $L^2(\Omega)$

Lemme 3.3.3 *Sous les hypothèses de la proposition 3.2.1, il existe une certaine fonction $u \in L^2([0, T] \times \Omega)$ telle que $\nabla u \in L^2([0, T] \times \Omega^+)$ et $\nabla u \in L^2([0, T] \times \Omega^-)$, avec les convergences suivantes, à l'extraction d'une sous-suite près :*

$$u_\varepsilon \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} u \text{ dans } L^2([0, T] \times \Omega), \quad (3.6)$$

$$\nabla u_\varepsilon \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \nabla u \text{ dans } L^2([0, T] \times \Omega^+). \quad (3.7)$$

Remarquons que ce lemme technique ne nous dit rien sur la fonction limite u .

Preuve : Tout d'abord, notons que la suite de fonctions $u_\varepsilon(t = 0)$ converge faiblement vers $u(t = 0)$ dans $L^2(\Omega)$. Par conséquent (voir [9]), la suite est uniformément bornée dans $L^2(\Omega)$:

$$\|u_\varepsilon(t = 0)\|_{L^2(\Omega)} \leq C, \quad (3.8)$$

pour une certaine constante $C > 0$ indépendante de ε . On considère le modèle exact définissant u_ε (2.3), on multiplie l'équation par u_ε , et on intègre sur le domaine fissuré Ω_ε :

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{\Omega_\varepsilon} u_\varepsilon^2(x, y, t) dx dy - \int_{\Omega_\varepsilon} \Delta u_\varepsilon(x, y, t) u_\varepsilon(x, y, t) dx dy = 0.$$

Par intégration par parties, et en utilisant les conditions limites issues de (2.3) pour évaluer les termes de bord, on a

$$\begin{aligned} - \int_{\Omega_\varepsilon} \Delta u_\varepsilon(x, y, t) u_\varepsilon(x, y, t) dx dy &= \int_{\Omega_\varepsilon} |\nabla u_\varepsilon(x, y, t)|^2 dx dy - \int_{\partial\Omega_\varepsilon} u_\varepsilon \partial_n u_\varepsilon \\ &= \int_{\Omega_\varepsilon} |\nabla u_\varepsilon(x, y, t)|^2 dx dy - \int_{\Gamma_\varepsilon^1} u_\varepsilon(x, y, t) dy - \frac{(\alpha - \beta)}{2} \varepsilon \int_{\Gamma_\varepsilon^\alpha} u_\varepsilon(x, y, t) dx - \frac{\beta}{\alpha} \int_{\Gamma_\varepsilon^\beta} u_\varepsilon(x, y, t) dy. \end{aligned}$$

En utilisant l'inégalité de Cauchy-Schwarz, on arrive à :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \left(\int_{\Omega_\varepsilon} u_\varepsilon^2(x, y, t) \right) + \int_{\Omega_\varepsilon} |\nabla u_\varepsilon(x, y, t)|^2 &= \int_{\Gamma_\varepsilon^1} u_\varepsilon + (\alpha - \beta) \varepsilon \int_{\Gamma_\varepsilon^\alpha} u_\varepsilon + \frac{\beta}{\alpha} \int_{\Gamma_\varepsilon^\beta} u_\varepsilon \\ &\leq \sqrt{\varepsilon(1 - \alpha)} \left(\int_{\Gamma_\varepsilon^1} u_\varepsilon^2 \right)^{1/2} + \frac{(\alpha - \beta)}{2} \varepsilon \sqrt{2} \left(\int_{\Gamma_\varepsilon^\alpha} u_\varepsilon^2 \right)^{1/2} + \beta \sqrt{\frac{\varepsilon}{\alpha}} \left(\int_{\Gamma_\varepsilon^\beta} u_\varepsilon^2 \right)^{1/2} \end{aligned}$$

On utilise ensuite l'estimation du Lemme 3.3.1, pour majorer chacun des trois termes du membre de droite de l'inégalité précédente pour trouver :

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \left(\int_{\Omega_\varepsilon} u_\varepsilon^2(x, y, t) \right) + \int_{\Omega_\varepsilon} |\nabla u_\varepsilon(x, y, t)|^2 \leq C \sqrt{\varepsilon} \left(\int_{\Omega_\varepsilon} u_\varepsilon^2 + \int_{\Omega_\varepsilon} |\nabla u_\varepsilon|^2 \right)^{1/2} \quad (3.9)$$

pour une certaine constante C ne dépendant que de α . On cherche ensuite à majorer le membre droite de l'inégalité précédente, vu comme le produit de $C\sqrt{\varepsilon}$ et de $\left(\int_{\Omega_\varepsilon} u_\varepsilon^2 + \int_{\Omega_\varepsilon} |\nabla u_\varepsilon|^2 \right)^{1/2}$. On transforme alors le produit en une somme, en utilisant l'inégalité :

$$ab < \frac{a^2}{2} + \frac{b^2}{2},$$

valable pour tous réels a, b . On montre ainsi qu'il existe une constante, que l'on désigne toujours par C , telle que :

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \left(\int_{\Omega_\varepsilon} u_\varepsilon^2(x, y, t) dx \right) - \int_{\Omega_\varepsilon} u_\varepsilon^2 \leq C\varepsilon.$$

On cherche ensuite à borner $\int_{\Omega_\varepsilon} u_\varepsilon^2$. Pour cela, on applique le Lemme de Gronwall sur $\int_{\Omega_\varepsilon} u_\varepsilon^2 + C\varepsilon$. Cela donne :

$$\int_{\Omega_\varepsilon} u_\varepsilon^2(x, y, t) dx + C\varepsilon \leq \left(\int_{\Omega_\varepsilon} u_\varepsilon^2(x, y, 0) dx + C\varepsilon \right) e^{2t}$$

Ensuite, on divise le domaine homogénéisé Ω en $1/\varepsilon$ domaines microscopiques de taille ε suivant la direction y et on applique l'inégalité précédente dans chacun des ces sous-domaines. Comme $u_\varepsilon = 0$ en dehors du domaine fissuré Ω_ε , on obtient :

$$\int_{\Omega} u_\varepsilon^2(x, y, t) dx dy \leq \left(\int_{\Omega} u_\varepsilon^2(x, y, 0) dx dy + C \right) e^{2t} - C \leq C e^{2t}, \quad (3.10)$$

pour une certaine constante $C > 0$, en utilisant la borne (3.8) pour la dernière inégalité. On intègre ensuite par rapport à t pour établir que la suite u_ε est bornée indépendamment de ε dans $L^2(\Omega \times [0, T])$. Par conséquent (voir par exemple [9]), on peut en extraire une sous-suite qui converge faiblement vers une certaine fonction $u \in L^2(\Omega \times [0, T])$.

On traite maintenant la seconde partie du Lemme concernant la convergence du gradient ∇u_ε . On revient alors sur la borne (3.9), que l'on intègre par rapport au temps, pour obtenir

$$\begin{aligned} \int_0^T \int_{\Omega_\varepsilon} |\nabla u_\varepsilon|^2(x, y, t) dx dy dt &\leq C\varepsilon T + \frac{1}{2} \int_{\Omega_\varepsilon} u_\varepsilon^2(x, y, 0) dx dy + \frac{1}{2} \int_0^T \int_{\Omega_\varepsilon} u_\varepsilon^2(x, y, t) dx dy dt \\ &\leq C\varepsilon T + C \left(\int_{\Omega_\varepsilon} u_\varepsilon^2(x, y, 0) dx dy \right) e^{2T}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Cela implique immédiatement que

$$\int_0^T \int_{\Omega^+} |\nabla u_\varepsilon|^2(x, y, t) dx dy dt \leq CT + C \left(\int_{\Omega} u_\varepsilon^2(x, y, 0) dx dy \right) e^{2T}. \quad (3.12)$$

Ainsi, u_ε est bornée dans $L^2([0, T], H^1(\Omega^+))$. Par conséquent, à extraction près, la suite des gradients ∇u_ε converge faiblement dans $L^2([0, T], L^2(\Omega^+))$, ce qui correspond bien à (3.7). \square

3.3.3 Estimation du terme de bord sur $\Gamma_\varepsilon^\alpha$

On cherche à établir une borne sur la valeur de la solution du problème exact u_ε sur le bord horizontal de la fissure $\Gamma_\varepsilon^\alpha$ (voir Fig. (2.1)).

Lemme 3.3.4 *Sous les hypothèses de la proposition 3.2.1, il existe une constante $C > 0$ indépendante de ε et T telle que :*

$$\|u_\varepsilon\|_{L^2([0, T] \times \Gamma_\varepsilon^\alpha)} \leq C e^{2T} \quad (3.13)$$

à l'extraction d'une sous-suite près.

Preuve : On revient à l'inégalité (3.11), qui implique que

$$\int_0^T \int_{\Omega_\varepsilon} |\nabla u_\varepsilon|^2 \leq C\varepsilon e^{2T},$$

où C ne dépend pas de ε ni de T . En effet, $u_\varepsilon(t=0)$ vérifie (3.8), et est ε -périodique par rapport à y . Ainsi,

$$\int_{\Omega_\varepsilon} u_\varepsilon^2(x, y, 0) dx dy \leq C\varepsilon.$$

Là encore, on utilise le changement d'échelle (3.5), c'est à dire

$$v_\varepsilon(x, y, t) = u_\varepsilon(x, \varepsilon y, t),$$

et on trouve par changement de variable

$$\int_0^T \int_{\Omega_1} (\partial_x v_\varepsilon)^2 + \frac{1}{\varepsilon^2} (\partial_y v_\varepsilon)^2 \leq C e^{2T}.$$

En particulier, v_ε est bornée dans $L^2([0, T], H^1(\Omega_1))$. En invoquant les théorèmes de trace [16, 19, 27], on en conclut que v_ε est bornée dans $L^2([0, T], H^{1/2}(\Gamma_1^\alpha))$, où

$$\Gamma_1^\alpha = \left\{ \left(x, \frac{\alpha}{2} \right), -1 < x < 0 \right\} \cup \left\{ \left(x, -\frac{\alpha}{2} \right), -1 < x < 0 \right\}.$$

En particulier, v_ε est bornée dans $L^2([0, T] \times \Gamma_1^\alpha)$. On remarque finalement que

$$\|u_\varepsilon\|_{L^2([0, T] \times \Gamma_\varepsilon^\alpha)} = \|v_\varepsilon\|_{L^2([0, T] \times \Gamma_1^\alpha)},$$

ce qui termine la preuve. □

3.3.4 Convergence sur les bords Γ^1 et Γ^0

On étudie la convergence de la suite de solutions u_ε sur les frontières verticales Γ^0 (en $x = 1$, où la fonction est nulle) et Γ^1 (en $x = -1$, où le flux est fixé à 1). Aussi, on étudie la convergence de u_ε au voisinage de l'interface $x = 0$ pour préparer l'étude de la couche limite et des conditions de transmission associées.

Lemme 3.3.5 *Sous les hypothèses de la Proposition 3.2.1, on a la convergence suivante, à l'extraction d'une sous-suite près :*

$$u_\varepsilon \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} u \text{ dans } L^2([0, T] \times \Gamma^1), \quad (3.14)$$

$$u_\varepsilon \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} u \text{ dans } L^2([0, T] \times \Gamma^0), \quad (3.15)$$

où u est définie par le Lemme 3.3.3. De plus, pour tout $\delta \in (0, 1)$, on a la convergence suivante, à l'extraction d'une sous-suite près :

$$u_\varepsilon \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} u \text{ dans } L^2([0, T] \times \Omega \cap \{x = -\delta\}), \quad (3.16)$$

$$u_\varepsilon \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} u \text{ dans } L^2([0, T] \times \Omega \cap \{x = \delta\}), \quad (3.17)$$

où u est définie par le Lemme 3.3.3.

Preuve : On sait déjà que u_ε converge faiblement vers u sans $L^2([0, T], H^1(\Omega^+))$. Par les théorèmes de trace, on en conclut que la suite converge faiblement dans $L^2([0, T], H^{1/2}(\Gamma^0))$, donc dans $L^2([0, T], L^2(\Gamma^0)) = L^2([0, T] \times \Gamma^0)$. Cela prouve la convergence faible (3.15).

Démontrons maintenant la convergence (3.14). Par (3.4), nous savons que u_ε est bornée dans $L^2([0, T] \times \Gamma^1)$, et converge donc faiblement (à extraction près) vers une certaine limite. Nous allons montrer que cette limite est u définie au Lemme 3.3.3. Pour cela, on utilise encore une fois le changement d'échelle (3.5),

$$v_\varepsilon(x, y, t) = u_\varepsilon(x, \varepsilon y, t).$$

On revient ensuite à la borne (3.11), qui implique après changement de variable que v_ε est bornée dans $L^2([0, T], H^1(\Omega_1))$. De là, la convergence suivante :

$$v_\varepsilon \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} v \text{ in } L^2([0, T], H^1(\Omega_1)),$$

pour une certaine fonction $v \in L^2([0, T], H^1(\Omega_1))$. Utilisant le lien entre u_ε et v_ε , on déduit immédiatement de la convergence (3.6), que

$$u(x, y, t) = \int_{-1/2}^{1/2} v(x, z, t) dz.$$

En outre, invoquant les théorèmes de trace [16, 19, 27], on a la convergence faible de v_ε vers v dans $L^2([0, T] \times H^{1/2}(\Gamma_1^1))$, donc dans $L^2([0, T] \times \Gamma_1^1)$. Définissons maintenant une fonction test φ dans $C^\infty([0, T] \times \Gamma^1)$, et calculons l'intégrale de $u_\varepsilon \varphi$ sur $[0, T] \times \Gamma^1$:

$$\begin{aligned} \int_0^T \int_{\Gamma^1} u_\varepsilon \varphi &= \sum_{k \in \mathbb{Z}, \varepsilon|k| < 1/2} \int_0^T \int_{\Gamma_\varepsilon^1 + \varepsilon k e_2} u_\varepsilon \varphi \\ &= \sum_{k \in \mathbb{Z}, \varepsilon|k| < 1/2} \int_0^T \int_{-\varepsilon/2}^{\varepsilon/2} u_\varepsilon(-1, y, t) \varphi(-1, y + k\varepsilon, t) dy dt \\ &= \sum_{k \in \mathbb{Z}, \varepsilon|k| < 1/2} \int_0^T \int_{-\varepsilon/2}^{\varepsilon/2} v_\varepsilon\left(-1, \frac{y}{\varepsilon}, t\right) \varphi(-1, y + k\varepsilon, t) dy dt \\ &= \sum_{k \in \mathbb{Z}, \varepsilon|k| < 1/2} \varepsilon \int_0^T \int_{-1/2}^{1/2} v_\varepsilon(-1, z, t) \varphi(-1, \varepsilon z + k\varepsilon, t) dz dt, \end{aligned}$$

où l'on utilise le fait que u_ε est prolongée par 0 à l'extérieur de Ω_ε , que u_ε est ε -périodique en y , et le lien entre u_ε et v_ε . Comme φ est supposée suffisamment régulière, on peut interpréter la somme sur $k \in \mathbb{Z}, \varepsilon|k| < 1/2$ comme une somme de Riemann :

$$\sum_{k \in \mathbb{Z}, \varepsilon|k| < 1/2} \varepsilon \varphi(-1, \varepsilon z + k\varepsilon, t) = \int_{-1/2}^{1/2} \varphi(-1, y, t) dy + O(\varepsilon),$$

où le reste ne dépend ni de z ni de v_ε . De là, comme v_ε converge vers v dans $L^2([0, T] \times \Gamma_1^1)$, on en déduit

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_0^T \int_{\Gamma^1} u_\varepsilon \varphi &= \int_0^T \left(\int_{-1/2}^{1/2} v(-1, z, t) dz \int_{-1/2}^{1/2} \varphi(-1, y, t) dy \right) dt \\ &= \int_0^T \int_{-1/2}^{1/2} u(-1, y, t) \varphi(-1, y, t) dy dt. \end{aligned}$$

Cela prouve (3.14).

La preuve de la convergence (3.16) suit exactement le même schéma. La preuve de (3.17) est une conséquence directe de la convergence (3.7) et des théorèmes de trace [16, 19, 27]. \square

3.3.5 Convergence sur le bord Γ^β

Ce dernier lemme technique traite de la convergence de la suite u_ε sur le bord vertical de l'indentation Γ_ε^β :

Lemme 3.3.6 *Sous les hypothèses de la Proposition 3.2.1, on a la convergence suivante, à l'extraction d'une sous-suite près :*

$$\frac{1}{\varepsilon} \int_0^T \int_{\Gamma_\varepsilon^\beta} u_\varepsilon \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \alpha \int_0^T \int_{\Gamma^\beta} u. \quad (3.18)$$

La fonction u étant définie au Lemme 3.3.3. Dans le membre droite, $\int_{\Gamma^\beta} u$ est la trace sur Γ_β de $u|_{\Omega^+}$.

Preuve : On commence par montrer que la fonction $I_\varepsilon = \int_0^T u_\varepsilon$ converge fortement dans $L^2(\Omega^+)$ (à extraction près) vers $I = \int_0^T u$. Pour établir la convergence forte de I_ε , on montre que I_ε est bornée dans $H^1(\Omega^+)$.

D'abord, on repart de l'estimation (3.10) établie sur u_ε :

$$\int_\Omega u_\varepsilon^2(x, y, t) dx dy \leq C e^{2t},$$

pour une certaine constante C indépendante de ε . On intègre l'inégalité sur le temps, entre 0 et T :

$$\int_0^T \int_\Omega u_\varepsilon^2(x, y, t) dx dy \leq C,$$

où C désigne une constante (éventuellement différente de la précédente) qui ne dépend que de T . Appliquons l'inégalité de Cauchy-Schwarz :

$$\left(\int_0^T u_\varepsilon \right)^2 \leq T \int_0^T u_\varepsilon^2,$$

de sorte que :

$$I_\varepsilon^2 \leq T \int_0^T u_\varepsilon^2.$$

Intégrons maintenant sur l'espace Ω :

$$\int_\Omega I_\varepsilon^2 \leq T \int_\Omega \int_0^T u_\varepsilon^2 \leq C,$$

où C est une constante qui ne dépend pas de ε , possiblement différente de la précédente.

Ensuite, on reprend l'estimation (3.12) établie sur ∇u_ε :

$$\int_0^T \int_{\Omega^+} |\nabla u_\varepsilon|^2(x, y, t) dx dy dt \leq CT + C \left(\int_\Omega u_\varepsilon^2(x, y, 0) dx dy \right) e^{2T}.$$

Or, par application de l'inégalité de Cauchy-Schwarz :

$$\int_{\Omega^+} |\nabla I_\varepsilon|^2 = \int_{\Omega^+} \left(\nabla \int_0^T u_\varepsilon \right)^2 = \int_{\Omega^+} \left(\int_0^T \nabla u_\varepsilon \right)^2 \leq T \int_{\Omega^+} \int_0^T |\nabla u_\varepsilon|^2.$$

L'estimation (3.12) implique donc immédiatement une borne sur $\int_{\Omega^+} |\nabla I_\varepsilon|^2$:

$$\int_{\Omega^+} |\nabla I_\varepsilon|^2 \leq C,$$

où C est une constante qui ne dépend que de T . I_ε est donc bornée dans $H^1(\Omega^+)$. Par application du théorème de Rellich, on peut donc en extraire une sous-suite qui converge fortement dans $L^2(\Omega^+)$ vers une certaine fonction I appartenant à $H^1(\Omega^+)$.

Il nous reste finalement à montrer que cette limite est bien $\int_0^T u$, où u est la limite faible de u_ε dans $L^2([0, T] \times \Omega)$. Soit φ une fonction test de $L^2([0, T] \times \Omega)$. On sait qu'à extraction près :

$$\int_0^T \int_\Omega u_\varepsilon \varphi \longrightarrow \int_0^T \int_\Omega u \varphi.$$

Considérons une fonction test ψ de $L^2(\Omega^+)$. Comme I_ε converge faiblement, on a (à extraction près) :

$$\int_{\Omega^+} I_\varepsilon \psi \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\Omega^+} I \psi.$$

On définit $\varphi(x, t) = \psi(x) \mathbf{1}_{\Omega^+}(x) \in L^2([0, T] \times \Omega)$. Alors :

$$\int_{\Omega^+} I_\varepsilon \psi = \int_0^T \int_\Omega u_\varepsilon \varphi \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \int_0^T \int_\Omega u \varphi = \int_{\Omega^+} \left(\int_0^T u \right) \psi,$$

d'après la convergence faible de u_ε . En identifiant les limites faibles, on a donc nécessairement :

$$I = \int_0^T u.$$

En utilisant la convergence forte de I_ε , on peut établir la convergence (3.18).

En effet, comme u_ε est ε -périodique en y , on a

$$\frac{1}{\varepsilon} \int_0^T \int_{\Gamma_\varepsilon^\beta} u_\varepsilon = \sum_{k \in \mathbb{Z}, \varepsilon|k| < 1/2} \int_0^T \int_{\Gamma_\varepsilon^\beta + k\varepsilon e_2} u_\varepsilon = \int_0^T \int_{\Gamma^\beta} u_\varepsilon \sum_{k \in \mathbb{Z}, \varepsilon|k| < 1/2} \mathbf{1}_{|y-k\varepsilon| < \alpha\varepsilon/2}.$$

Cette dernière égalité peut se récrire à l'aide de I_ε suivant :

$$\int_0^T \int_{\Gamma^\beta} u_\varepsilon \sum_{k \in \mathbb{Z}, \varepsilon|k| < 1/2} \mathbf{1}_{|y-k\varepsilon| < \alpha\varepsilon/2} = \int_{\Gamma^\beta} I_\varepsilon \sum_{k \in \mathbb{Z}, \varepsilon|k| < 1/2} \mathbf{1}_{|y-k\varepsilon| < \alpha\varepsilon/2}.$$

Dans cette intégrale, on a une convergence forte sur I_ε , tandis que

$$\sum_{k \in \mathbb{Z}, \varepsilon|k| < 1/2} \mathbf{1}_{|y-k\varepsilon| < \alpha\varepsilon/2} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \alpha \text{ dans } L^2([0, T] \times \Gamma^\beta)^5.$$

On peut ainsi passer à la limite pour obtenir (3.18). □

3.4 Preuve de convergence

A partir des lemmes techniques précédents, nous sommes en mesure de donner la preuve de la Proposition 3.2.1.

On applique tout d'abord les Lemmes 3.3.3, 3.3.4 et 3.3.5, pour obtenir les convergences (3.6), (3.7), (3.13) et (3.14). Il s'agit ensuite de prouver que la limite u correspond à la solution du modèle homogénéisé MOSAIC défini par (2.27)-(2.28)-(2.29). Pour cela, on commence par définir le sous-domaine fissuré :

$$\Omega_\varepsilon^- = \Omega_\varepsilon \cap \{x < 0\}, \quad (3.19)$$

et le sous-domaine correspondant à la partie intègre :

$$\Omega_\varepsilon^+ = \Omega_\varepsilon \cap \{x > 0\}. \quad (3.20)$$

Puis, on considère l'ensemble des fonctions test φ telles que : $\varphi \in C^\infty(\Omega \times [0, T])$ et 1-périodique en y , avec :

$$\forall (x, y) \in \Omega, \varphi(x, y, T) = 0, \quad \text{et} \quad \forall y \in \left(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \forall t \in [0, T], \varphi(0, y, t) = \partial_x \varphi(0, y, t) = 0.$$

On multiplie ensuite l'équation vérifiée par u_ε par φ , et on intègre sur $\Omega_\varepsilon^+ \times [0, T]$:

$$\int_0^T \int_{\Omega_\varepsilon^+} \partial_t u_\varepsilon \varphi dx dy dt - \int_0^T \int_{\Omega_\varepsilon^+} \Delta u_\varepsilon \varphi dx dy dt = 0. \quad (3.21)$$

5. voir aussi (3.31) pour une démonstration détaillée de la convergence faible des fonctions indicatrices.

Pour le premier terme, on intègre par parties par rapport à t , pour obtenir

$$\begin{aligned} \int_0^T \int_{\Omega_\varepsilon^+} \partial_t u_\varepsilon \varphi dx dy dt &= - \int_0^T \int_{\Omega_\varepsilon^+} u_\varepsilon \partial_t \varphi dx dy dt \\ &\quad - \int_{\Omega_\varepsilon^+} u_\varepsilon(x, y, 0) \varphi(x, y, 0) dx dy \end{aligned} \quad (3.22)$$

On répète alors ce procédé dans chaque sous-domaine microscopique $\Omega_\varepsilon^+ + k\varepsilon e_2$, où $k \in \mathbb{Z}$ et $\varepsilon|k| < 1/2$, correspondant à la partie entière du milieu. Comme l'union de ces sous-domaines est Ω^+ (en supposant que ε^{-1} est un entier), on a

$$\begin{aligned} \int_0^T \int_{\Omega^+} \partial_t u_\varepsilon \varphi dx dy dt &= - \int_0^T \int_{\Omega^+} u_\varepsilon \partial_t \varphi dx dy dt \\ &\quad - \int_{\Omega^+} u_\varepsilon(x, y, 0) \varphi(x, y, 0) dx dy \end{aligned} \quad (3.23)$$

La convergence faible de u_ε dans $L^2(\Omega \times [0, T])$ et de $u_\varepsilon(t=0)$ in $L^2(\Omega)$ permet de passer à la limite dans les intégrales du membre de droite. On trouve alors

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \sum_{k \in \mathbb{Z}, \varepsilon|k| < \frac{1}{2}} \int_0^T \int_{\Omega_\varepsilon^+ + k\varepsilon e_2} \partial_t u_\varepsilon \varphi dx dy dt &= \\ &\quad - \int_0^T \int_{\Omega^+} u \partial_t \varphi dx dy dt - \int_{\Omega^+} u(x, y, 0) \varphi(x, y, 0) dx dy \end{aligned} \quad (3.24)$$

La même démarche permet de prouver la convergence dans Ω^- (rappelons que l'on a prolongé u_ε par 0 à l'extérieur de Ω_ε) :

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \sum_{k \in \mathbb{Z}, \varepsilon|k| < \frac{1}{2}} \int_0^T \int_{\Omega_\varepsilon^- + k\varepsilon e_2} \partial_t u_\varepsilon \varphi dx dy dt &= - \int_0^T \int_{\Omega^-} u \partial_t \varphi dx dy dt - \int_{\Omega^-} u(x, y, 0) \varphi(x, y, 0) dx dy \end{aligned} \quad (3.25)$$

On traite ensuite le second terme de (3.21). Une intégration par parties par rapport à (x, y) et les conditions limites sur u_ε , permettent de déduire

$$\begin{aligned} \int_0^T \int_{\Omega_\varepsilon^+} \Delta u_\varepsilon \varphi dx dy dt &= \int_0^T \int_{\partial\Omega_\varepsilon^+} \partial_n u_\varepsilon \varphi - \int_0^T \int_{\Omega_\varepsilon^+} \nabla u_\varepsilon \cdot \nabla \varphi \\ &= - \int_0^T \int_{\Omega_\varepsilon^+} \nabla u_\varepsilon \cdot \nabla \varphi. \end{aligned} \quad (3.26)$$

Utilisant la convergence (3.7) sur le gradient ∇u_ε , on a

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \sum_{k \in \mathbb{Z}, \varepsilon|k| < \frac{1}{2}} \int_0^T \int_{\Omega_\varepsilon^+ + k\varepsilon e_2} \Delta u_\varepsilon \varphi dx dy dt = - \int_0^T \int_{\Omega^+} \nabla u \cdot \nabla \varphi.$$

Ceci et (3.24) impliquent

$$-\int_0^T \int_{\Omega^+} u \partial_t \varphi dx dy dt - \int_{\Omega^+} u(x, y, 0) \varphi(x, y, 0) dx dy = -\int_0^T \int_{\Omega^+} \nabla u \cdot \nabla \varphi, \quad (3.27)$$

ce qui correspond à la formulation faible de (2.28).

Nous appliquons maintenant cette même stratégie sur le sous-domaine contenant les fissures Ω_ε^- , mais la situation est plus délicate ici, en raison de la présence des indentations.

On revient à (3.25), où l'on a intégré par parties sur Ω_ε^- .

De plus, on a

$$\begin{aligned} \int_0^T \int_{\Omega_\varepsilon^-} \Delta u_\varepsilon \varphi dx dy dt &= \int_0^T \int_{\partial \Omega_\varepsilon^-} \partial_n u_\varepsilon \varphi - \int_0^T \int_{\partial \Omega_\varepsilon^-} u_\varepsilon \partial_n \varphi + \int_0^T \int_{\Omega_\varepsilon^-} u_\varepsilon \Delta \varphi \\ &= \int_0^T \int_{\Gamma_\varepsilon^1} \varphi + \int_0^T (\alpha - \beta) \frac{\varepsilon}{2} \int_{\Gamma_\varepsilon^\alpha} \varphi - \int_0^T \int_{\partial \Omega_\varepsilon^-} u_\varepsilon \partial_n \varphi + \int_0^T \int_{\Omega_\varepsilon^-} u_\varepsilon \Delta \varphi. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Afin d'établir une intégrale sur le sous-domaine homogénéisé Ω^- , on répète cette opération sur chaque sous-domaine fissuré $\Omega_\varepsilon^- + \varepsilon k$, où $k \in \mathbb{Z}$ et $\varepsilon |k| \leq 1/2$. On a ainsi (3.28) dans chacun de ces sous-domaines microscopiques. On somme ensuite les égalités obtenues par rapport à l'indice k . On définit maintenant le sous-domaine

$$\tilde{\Omega}_\varepsilon^- = \bigcup_{k \in \mathbb{Z}, \varepsilon |k| < 1/2} (\Omega_\varepsilon^- + \varepsilon k e_2), \quad (3.29)$$

formé de l'union des cellules microscopiques, obtenu en ne retenant que la partie fissurée ($x < 0$). On trouve alors

$$\begin{aligned} \int_0^T \int_{\tilde{\Omega}_\varepsilon^-} \Delta u_\varepsilon \varphi dx dy dt &= \sum_{k \in \mathbb{Z}, \varepsilon |k| < 1/2} \int_0^T \int_{\Gamma_\varepsilon^1 + \varepsilon k e_2} \varphi \\ &+ \sum_{k \in \mathbb{Z}, \varepsilon |k| < 1/2} \int_0^T (\alpha - \beta) \frac{\varepsilon}{2} \int_{\Gamma_\varepsilon^\alpha + \varepsilon k e_2} \varphi - \sum_{k \in \mathbb{Z}, \varepsilon |k| < 1/2} \int_0^T \int_{\partial(\Omega_\varepsilon^- + \varepsilon k e_2)} u_\varepsilon \partial_n \varphi \\ &+ \int_0^T \int_{\Omega^-} u_\varepsilon \Delta \varphi. \end{aligned} \quad (3.30)$$

On traite chaque terme du membre de droite de (3.30) séparément : pour le premier terme, on a

$$\sum_{k \in \mathbb{Z}, \varepsilon |k| < 1/2} \int_0^T \int_{\Gamma_\varepsilon^1 + \varepsilon k e_2} \varphi \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} (1 - \alpha) \int_0^T \int_{\Gamma^1} \varphi. \quad (3.31)$$

Pour établir la convergence (3.31), on écrit :

$$\sum_{k \in \mathbb{Z}, \varepsilon |k| < 1/2} \int_0^T \int_{\Gamma_\varepsilon^1 + \varepsilon k e_2} \varphi = \int_0^T \int_{\Gamma^1} \varphi \mathbf{1}_{|y - k\varepsilon| > \alpha\varepsilon/2}.$$

Soit

$$\chi^\varepsilon(y) = \sum_{k \in \mathbb{Z}, \varepsilon|k| < 1/2} \mathbf{1}_{|y-k\varepsilon| > \alpha\varepsilon/2}.$$

On veut montrer la convergence faible

$$\chi^\varepsilon \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} (1 - \alpha) \text{ dans } L^2([0, T] \times \Gamma^1).$$

Il suffit de montrer la convergence faible

$$\chi^\varepsilon \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} (1 - \alpha) \text{ dans } L^2([-1/2, 1/2]).$$

ou encore la convergence faible

$$1 - \chi^\varepsilon \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \alpha \text{ dans } L^2([-1/2, 1/2]).$$

Il suffit de montrer que, pour tout $\phi \in \mathcal{C}^\infty([-1/2, 1/2])$, on a

$$\int_{-1/2}^{1/2} (1 - \chi^\varepsilon)(y) \phi(y) dy \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \alpha \int_{-1/2}^{1/2} \phi(y) dy \quad (3.32)$$

On écrit :

$$\begin{aligned} \int_{-1/2}^{1/2} (1 - \chi^\varepsilon)(y) \phi(y) dy &= \sum_{k \in \mathbb{Z}, \varepsilon|k| < 1/2} \int_{-\alpha\varepsilon/2}^{\alpha\varepsilon/2} \phi(k\varepsilon + z) dz \\ &= X^\varepsilon + Y^\varepsilon \end{aligned}$$

avec

$$\begin{aligned} X^\varepsilon &= \sum_{k \in \mathbb{Z}, \varepsilon|k| < 1/2} \int_{-\alpha\varepsilon/2}^{\alpha\varepsilon/2} \phi(k\varepsilon + z) - \phi(k\varepsilon) dz \\ Y^\varepsilon &= \alpha\varepsilon \sum_{k \in \mathbb{Z}, \varepsilon|k| < 1/2} \phi(k\varepsilon) \end{aligned}$$

Le premier terme est majoré par

$$|X^\varepsilon| \leq \sum_{k \in \mathbb{Z}, \varepsilon|k| < 1/2} \int_{-\alpha\varepsilon/2}^{\alpha\varepsilon/2} \|\phi'\|_\infty z dz = \frac{\|\phi'\|_\infty \alpha^2}{2} \varepsilon$$

et converge donc vers 0 quand $\varepsilon \rightarrow 0$. Le second terme est une somme de Riemann et converge donc :

$$Y^\varepsilon \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \alpha \int_{-1/2}^{1/2} \phi(y) dy,$$

ce qui donne (3.32) et établit la convergence (3.31).

Ensuite, revenons au second terme du membre de droite de (3.30). Ce terme peut s'interpréter comme une somme de Riemann par rapport à k pour l'application $y \mapsto \int_{\Gamma_\varepsilon^\alpha + ye_2} \varphi$.

Comme φ est régulière, on a

$$\sum_{k \in \mathbb{Z}, \varepsilon|k| < 1/2} \int_0^T (\alpha - \beta) \frac{\varepsilon}{2} \int_{\Gamma_\varepsilon^\alpha + \varepsilon k e_2} \varphi \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} (\alpha - \beta) \int_0^T \int_{\Omega^-} \varphi. \quad (3.33)$$

Considérons finalement le troisième terme du membre de droite de (3.30). Par la définition (3.29) du sous domaine $\tilde{\Omega}_\varepsilon^-$, on note tout d'abord que ce terme est égal à

$$\begin{aligned} \sum_{k \in \mathbb{Z}, \varepsilon|k| < 1/2} \int_0^T \int_{\partial(\Omega_\varepsilon^- + \varepsilon k e_2)} u_\varepsilon \partial_n \varphi &= \int_0^T \int_{\partial \tilde{\Omega}_\varepsilon^-} u_\varepsilon \partial_n \varphi \\ &= - \sum_{\varepsilon|k| < 1/2} \int_0^T \int_{\Gamma_\varepsilon^1 + \varepsilon k e_2} u_\varepsilon \partial_x \varphi + \sum_{\varepsilon|k| < 1/2} \int_0^T \int_{\Gamma_\varepsilon^\alpha + \varepsilon k e_2} u_\varepsilon \partial_n \varphi \end{aligned} \quad (3.34)$$

Là encore, on traite chaque terme du membre de droite de (3.34) séparément. Le premier terme s'écrit

$$- \sum_{\varepsilon|k| < 1/2} \int_0^T \int_{\Gamma_\varepsilon^1 + \varepsilon k e_2} u_\varepsilon \partial_x \varphi = - \int_0^T \int_{\Gamma^1} u_\varepsilon \partial_x \varphi.$$

Ainsi, en utilisant la convergence (3.14) sur u_ε , on trouve

$$- \sum_{\varepsilon|k| < 1/2} \int_0^T \int_{\Gamma_\varepsilon^1 + \varepsilon k e_2} u_\varepsilon \partial_x \varphi \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} - \int_{\Gamma^1} u \partial_x \varphi. \quad (3.35)$$

On considère ensuite le second terme du membre de droite de (3.34), pour lequel on remarque que la valeur de u_ε sur chaque frontière $\Gamma_\varepsilon^\alpha + \varepsilon k e_2$, correspondant aux bords horizontaux de la fissure, est en fait indépendante de k . On invoque pour cela la périodicité de u_ε par rapport à y avec une période égale à ε . En utilisant :

$$u_\varepsilon(x, \pm \alpha \varepsilon / 2 + k \varepsilon, t) = u_\varepsilon(x, \pm \alpha \varepsilon / 2, t),$$

on écrit

$$\begin{aligned} \sum_{\varepsilon|k| < 1/2} \int_0^T \int_{\Gamma_\varepsilon^\alpha + \varepsilon k e_2} u_\varepsilon \partial_n \varphi &= \\ &= \sum_{\varepsilon|k| < 1/2} \int_0^T \int_{-1}^0 u_\varepsilon \left(x, -\frac{\alpha}{2} \varepsilon, t \right) \partial_y \varphi \left(x, \varepsilon k - \frac{\alpha}{2} \varepsilon, t \right) dx dt \\ &\quad - \sum_{\varepsilon|k| < 1/2} \int_0^T \int_{-1}^0 u_\varepsilon \left(x, \frac{\alpha}{2} \varepsilon, t \right) \partial_y \varphi \left(x, \varepsilon k + \frac{\alpha}{2} \varepsilon, t \right) dx dt. \end{aligned}$$

On effectue alors un développement limité de φ par rapport à la variable y , autour du point $y = \varepsilon k$:

$$\partial_y \varphi \left(x, \varepsilon k \pm \frac{\alpha}{2} \varepsilon, t \right) = \partial_y \varphi(x, \varepsilon k, t) \pm \varepsilon \frac{\alpha}{2} \partial_y^2 \varphi(x, \varepsilon k, t) + O(\varepsilon^2).$$

Le reste en $O(\varepsilon^2)$ ne dépend que de φ , et peut être borné de manière indépendante de x et de t . On a ainsi,

$$\begin{aligned} \sum_{\varepsilon|k|<1/2} \int_0^T \int_{\Gamma_\varepsilon^\alpha + \varepsilon k e_2} u_\varepsilon \partial_y \varphi &= O(\varepsilon) \\ &+ \sum_{\varepsilon|k|<1/2} \int_0^T \int_{-1}^0 \left(u_\varepsilon \left(x, -\frac{\alpha}{2} \varepsilon, t \right) - u_\varepsilon \left(x, \frac{\alpha}{2} \varepsilon, t \right) \right) \partial_y \varphi(x, \varepsilon k, t) dx dt \\ &- \varepsilon \frac{\alpha}{2} \sum_{\varepsilon|k|<1/2} \int_0^T \int_{-1}^0 \left(u_\varepsilon \left(x, -\frac{\alpha}{2} \varepsilon, t \right) + u_\varepsilon \left(x, \frac{\alpha}{2} \varepsilon, t \right) \right) \partial_y^2 \varphi(x, \varepsilon k, t) dx dt. \end{aligned}$$

Le dernier terme s'interprète comme une somme de Riemann par rapport à k . L'intégrale correspondante est

$$\int_{-1/2}^{1/2} \partial_y^2 \varphi(x, y, t) dy = 0,$$

comme φ est supposée 1-périodique par rapport à y .

Ainsi, en utilisant la majoration du Lemme 3.3.4, on déduit immédiatement que ce dernier terme tend vers 0. Pour le premier terme, on suit la même stratégie : on écrit la somme sur k comme suit, en utilisant à nouveau un développement limité sur $\partial_y \varphi$ par rapport à y autour du point εk :

$$\begin{aligned} \sum_{\varepsilon|k|<1/2} \partial_y \varphi(x, \varepsilon k, t) &= \sum_{\varepsilon|k|<1/2} \left(\partial_y \varphi(x, \varepsilon k, t) - \frac{1}{\varepsilon} \int_{\varepsilon k - \varepsilon/2}^{\varepsilon k + \varepsilon/2} \partial_y \varphi(x, y, t) dy \right) \\ &= \sum_{\varepsilon|k|<1/2} \int_{\varepsilon k - \varepsilon/2}^{\varepsilon k + \varepsilon/2} \frac{\partial_y \varphi(x, \varepsilon k, t) - \partial_y \varphi(x, y, t)}{\varepsilon} dy \\ &= \sum_{\varepsilon|k|<1/2} \partial_y^2 \varphi(x, \varepsilon k, t) \frac{1}{\varepsilon} \int_{-\varepsilon/2}^{\varepsilon/2} y dy \\ &\quad + \sum_{\varepsilon|k|<1/2} \partial_y^3 \varphi(x, \varepsilon k, t) \frac{1}{\varepsilon} \int_{-\varepsilon/2}^{\varepsilon/2} y^2 dy + O(\varepsilon), \end{aligned}$$

où le reste $O(\varepsilon)$ est uniformément borné par rapport à x et t . Le premier terme disparaît parce que l'intégrand est impair par rapport à y sur l'intervalle $[-\varepsilon/2, \varepsilon/2]$. On peut montrer que le second terme est d'ordre ε en calculant les intégrales explicitement. On a donc finalement,

$$\sum_{\varepsilon|k|<1/2} \int_0^T \int_{\Gamma_\varepsilon^\alpha + \varepsilon k e_2} u_\varepsilon \partial_n \varphi \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0. \quad (3.36)$$

En insérant (3.35) et (3.36) dans (3.34), on déduit

$$\sum_{k \in \mathbb{Z}, \varepsilon|k|<1/2} \int_0^T \int_{\partial(\Omega_\varepsilon + \varepsilon k e_2)} u_\varepsilon \partial_n \varphi \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} - \int_{\Gamma^1} u \partial_x \varphi. \quad (3.37)$$

Ensuite, on collecte (3.31), (3.33), (3.37), et on les insère dans (3.30). On obtient,

$$\int_0^T \int_{\tilde{\Omega}_\varepsilon^-} \Delta u_\varepsilon \varphi dx dy dt \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} (1-\alpha) \int_0^T \int_{\Gamma^1} \varphi + (\alpha-\beta) \int_0^T \int_{\Omega^-} \varphi - \int_{\Gamma^1} u \partial_x \varphi - \int_0^T \int_{\Omega^-} u \Delta \varphi.$$

Finalement, on utilise cette convergence et celle correspondant à (3.25), pour les insérer dans l'équation

$$\int_0^T \int_{\Omega_\varepsilon^-} \partial_t u_\varepsilon \varphi dx dy dt - \int_0^T \int_{\Omega_\varepsilon^-} \Delta u_\varepsilon \varphi dx dy dt = 0,$$

on trouve alors

$$\begin{aligned} & - \int_0^T \int_{\Omega^-} u \partial_t \varphi dx dy dt - \int_{\Omega^-} u(x, y, 0) \varphi(x, y, 0) dx dy dt = \\ & (1-\alpha) \int_0^T \int_{\Gamma^1} \varphi + (\alpha-\beta) \int_0^T \int_{\Omega^-} \varphi + \int_0^T \int_{\Omega^-} \nabla u \cdot \nabla \varphi, \end{aligned} \quad (3.38)$$

ce qui correspond à la formulation faible de (2.27).

Pour terminer la preuve, il nous reste à prouver les conditions de transmission (2.29).

Pour cela, on remarque d'abord que, puisque $u_\varepsilon \rightharpoonup u$ dans $L^2([0, T] \times \Omega)$ et puisque u_ε est ε -périodique en y , u doit nécessairement être indépendante de y . En effet, en revenant au changement d'échelle par rapport à y :

$$v_\varepsilon(x, y, t) = u_\varepsilon(x, \varepsilon y, t),$$

on peut montrer que v_ε converge faiblement vers v dans $L^2([0, T] \times H^1(\Omega_1))$ (voir aussi le début de la preuve du lemme 3.3.5). D'autre part, en utilisant le lien entre u_ε et v_ε , et la convergence vers la valeur moyenne (2.26), on a nécessairement :

$$u(x, y, t) = \int_{-1/2}^{1/2} v(x, z, t) dz,$$

ce qui montre que u est en fait indépendante de y .

Ensuite, on définit une fonction test φ ne dépendant que du temps t , définie sur un support compact $(0, T)$. On multiplie alors la première équation de (2.3) par φ et on intègre sur $[0, T] \times \tilde{\Omega}_{\varepsilon, \delta}$, où

$$\tilde{\Omega}_{\varepsilon, \delta} = \tilde{\Omega}_\varepsilon \cap \{|x| < \delta\}.$$

(Rappelons que $\tilde{\Omega}_\varepsilon$ est défini par (3.29), voir aussi Fig. 2.2.) En intégrant par parties, on a

$$\begin{aligned} 0 &= \int_0^T \int_{\tilde{\Omega}_{\varepsilon, \delta}} (\partial_t u_\varepsilon - \Delta u_\varepsilon) \varphi(t) dx dy dt \\ &= - \int_0^T \int_{\tilde{\Omega}_{\varepsilon, \delta}} u_\varepsilon \partial_t \varphi - \int_0^T \int_{\partial(\tilde{\Omega}_{\varepsilon, \delta})} \partial_n u_\varepsilon \varphi \end{aligned}$$

En développant le terme de bord, on a :

$$\begin{aligned}
 0 = & - \int_0^T \int_{\tilde{\Omega}_{\varepsilon,\delta}} u_\varepsilon \partial_t \varphi - \int_0^T \int_{\Omega \cap \{x=\delta\}} \partial_x u_\varepsilon \varphi + \int_0^T \int_{\tilde{\Omega}_\varepsilon \cap \{x=-\delta\}} \partial_x u_\varepsilon \varphi \\
 & - (\alpha - \beta) \frac{\varepsilon}{2} \sum_{k \in \mathbb{Z}, \varepsilon|k| < 1/2} \int_0^T \int_{-\delta}^0 2\varphi(t) dx dt \\
 & - \frac{\beta}{\alpha} \sum_{k \in \mathbb{Z}, \varepsilon|k| < 1/2} \int_0^T \int_{\Gamma_\varepsilon^\beta + k\varepsilon e_2} \varphi.
 \end{aligned} \tag{3.39}$$

Les deux derniers termes de (3.39) proviennent de l'intégrale de $\partial_n u_\varepsilon \varphi$ sur les bords du domaine fissuré rappelés sur la Fig. 3.1.

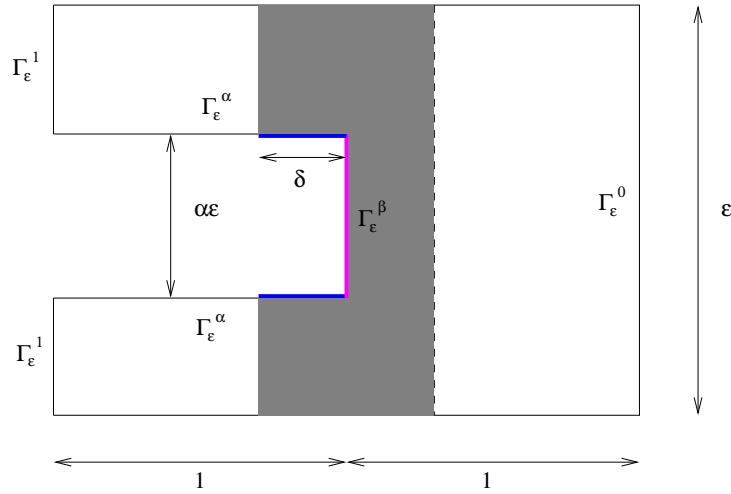


FIGURE 3.1 – Contours d'intégration du domaine $\tilde{\Omega}_{\varepsilon,\delta}$.

Les segments bleus correspondent au quatrième terme du membre de droite de (3.39). Sur ces deux parties horizontales, correspondant à une portion de largeur δ de l'interface $\Gamma_\varepsilon^\alpha$, la condition de flux imposé est $\partial_n u_\varepsilon = \frac{\alpha-\beta}{2}\varepsilon$. Le segment magenta correspond au dernier terme du membre de droite de (3.39). Sur ce segment vertical, situé en $x = 0$, le flux imposé est $\partial_n u_\varepsilon = \frac{\beta}{\alpha}$.

Analysons séparément chacun des termes de (3.39) : pour le premier terme, on peut immédiatement passer à la limite dans l'intégrale en invoquant la convergence faible de u_ε vers u ; les deux derniers termes correspondent à des intégrales explicites sur φ . Le second et le troisième terme nécessitent une analyse plus poussée. Pour le second terme, on revient à l'équation du modèle exact (2.3) que l'on multiplie par φ et que l'on intègre sur le domaine $\tilde{\Omega}_\varepsilon \cap \{x < -\delta\}$ au lieu de $\tilde{\Omega}_{\varepsilon,\delta}$.

En intégrant par parties, on trouve

$$\begin{aligned}
 0 &= - \int_0^T \int_{\tilde{\Omega}_\varepsilon \cap \{x < -\delta\}} u_\varepsilon \partial_t \varphi - \int_0^T \int_{\tilde{\Omega}_\varepsilon \cap \{x = -\delta\}} \partial_x u_\varepsilon \varphi \\
 &\quad - (\alpha - \beta) \frac{\varepsilon}{2} \sum_{k \in \mathbb{Z}, \varepsilon |k| < 1/2} \int_0^T \int_{-1}^{-\delta} 2\varphi(t) dx dt \\
 &\quad - \sum_{k \in \mathbb{Z}, \varepsilon |k| < 1/2} \int_0^T \int_{\Gamma_\varepsilon^1 + k\varepsilon e_2} \varphi.
 \end{aligned}$$

On peut passer à la limite dans le premier terme (en utilisant la convergence faible de u_ε) et dans le troisième terme (que l'on peut interpréter comme une somme de Riemann), on trouve ainsi

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_0^T \int_{\tilde{\Omega}_\varepsilon \cap \{x = -\delta\}} \partial_x u_\varepsilon \varphi = - \int_0^T \int_{\tilde{\Omega}_\varepsilon \cap \{x < -\delta\}} u \partial_t \varphi + (\alpha - \beta) \int_0^T \int_{\Omega \cap \{x < -\delta\}} \varphi - (1 - \alpha) \int_0^T \int_{\Gamma^1} \varphi.$$

Ensuite, on revient à l'équation vérifiée par la solution u du modèle homogénéisé, correspondant à (2.27). On la multiplie par φ et on intègre par parties. En combinant avec l'équation précédente, on arrive à :

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_0^T \int_{\tilde{\Omega}_\varepsilon \cap \{x = -\delta\}} \partial_x u_\varepsilon \varphi = \int_0^T \int_{\Omega \cap \{x = -\delta\}} \partial_x u \varphi. \quad (3.40)$$

De même, en intégrant sur $\tilde{\Omega}_\varepsilon \cap \{x > \delta\}$, on a

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_0^T \int_{\tilde{\Omega}_\varepsilon \cap \{x = \delta\}} \partial_x u_\varepsilon \varphi = \int_0^T \int_{\Omega \cap \{x = \delta\}} \partial_x u \varphi. \quad (3.41)$$

On insère (3.40) et (3.41) dans (3.39), et on interprète le dernier terme de (3.39) comme une somme de Riemann, pour obtenir

$$\begin{aligned}
 0 &= - \int_0^T \int_{\Omega \cap \{|x| < \delta\}} u \partial_t \varphi - \int_0^T \int_{\Omega \cap \{x = \delta\}} \partial_x u \varphi + \int_0^T \int_{\Omega \cap \{x = -\delta\}} \partial_x u \varphi \\
 &\quad - (\alpha - \beta) \delta \int_0^T \varphi(t) dt - \beta \int_0^T \int_{\Gamma^\beta} \varphi.
 \end{aligned}$$

De là, on fait tendre δ vers 0, et exploitant le fait que u est indépendant de y , on trouve la première condition de transmission sur u :

$$\partial_x u^- = \partial_x u^+ + \beta \quad \text{en } x = 0. \quad (3.42)$$

Pour établir la seconde condition de transmission, on applique la même stratégie, mais cette fois, on multiplie l'équation du modèle exact (2.3) par $x\varphi(t)$ au lieu de $\varphi(t)$, on trouve alors

$$0 = - \int_0^T \int_{\Omega \cap \{|x| < \delta\}} x u_\varepsilon \partial_t \varphi + \int_0^T \int_{\partial(\tilde{\Omega}_{\varepsilon, \delta})} u_\varepsilon \partial_n (x\varphi) - x\varphi \partial_n u_\varepsilon.$$

Comme $x\varphi$ ne dépend pas y , le premier terme de bord ne contient que des termes de bord sur les frontières verticales $\{x = \delta\}$, $\tilde{\Omega}_\varepsilon \cap \{x = -\delta\}$, et $\Gamma_\varepsilon^\beta + k\varepsilon e_2$, for $k \in \mathbb{Z}$, $\varepsilon|k| < 1/2$.

On a ainsi

$$\begin{aligned}
 0 &= - \int_0^T \int_{\Omega \cap \{|x| < \delta\}} x u_\varepsilon \partial_t \varphi \\
 &\quad + \int_0^T \int_{\Omega \cap \{x = \delta\}} u_\varepsilon \varphi - \int_0^T \int_{\tilde{\Omega}_\varepsilon \cap \{x = -\delta\}} u_\varepsilon \varphi - \sum_{k \in \mathbb{Z}, \varepsilon|k| < 1/2} \int_0^T \int_{\Gamma_\varepsilon^\beta + k\varepsilon e_2} u_\varepsilon \varphi \\
 &\quad - \int_0^T \int_{\Omega \cap \{x = \delta\}} \partial_x u_\varepsilon x \varphi + \int_0^T \int_{\tilde{\Omega}_\varepsilon \cap \{x = -\delta\}} \partial_x u_\varepsilon x \varphi \\
 &\quad - (\alpha - \beta) \frac{\varepsilon}{2} \sum_{k \in \mathbb{Z}, \varepsilon|k| < 1/2} \int_0^T \int_{-\delta}^0 2x \varphi(t) dx dt
 \end{aligned}$$

Ici encore, on invoque la convergence de u_ε dans $L^2([0, T] \times \Omega \cap \{x = -\delta\})$ (3.16), la convergence (3.17) dans $L^2([0, T] \times \Omega \cap \{x = +\delta\})$, la convergence (3.18) sur le bord vertical Γ^β , les intégration par parties (3.41) et (3.40), de manière à passer à la limite dans l'équation précédente.

On trouve alors

$$\begin{aligned}
 0 &= - \int_0^T \int_{\Omega \cap \{|x| < \delta\}} x u \partial_t \varphi + \int_0^T \int_{\Omega \cap \{x = \delta\}} u \varphi - \int_0^T \int_{\Omega \cap \{x = -\delta\}} u \varphi - \alpha \int_0^T \int_{\Gamma^\beta} u^+ \varphi \\
 &\quad - \int_0^T \int_{\Omega \cap \{x = \delta\}} \partial_x u_\varepsilon x \varphi + \int_0^T \int_{\tilde{\Omega}_\varepsilon \cap \{x = -\delta\}} \partial_x u_\varepsilon x \varphi - (\alpha - \beta) \frac{\delta^2}{2} \int_0^T \varphi
 \end{aligned}$$

Ainsi, en faisant tendre $\delta \rightarrow 0$, on a

$$u^+ - u^- - \alpha u^+ = 0 \quad \text{en } x = 0. \quad (3.43)$$

Collectant (3.42) et (3.43), on retrouve bien les conditions de transmissions (2.29), traduisant l'existence d'une couche limite au voisinage du bord vertical de la fissure en $x = 0$.

Ainsi, nous avons montré que, à l'extraction d'une sous-suite près, la suite u_ε tend vers u , faiblement dans L^2 , et que $u \in H^1(\Omega)$ est solution du modèle homogénéisé MOSAIC (2.27)-(2.28)-(2.29). Ensuite, nous remarquons que, conformément au Lemme 2.7.1 relatif à l'existence et l'unicité de la solution du problème homogénéisé, u est uniquement déterminée. Par conséquent, la suite admet une unique valeur d'adhérence et c'est bien toute la suite qui converge vers u , sans avoir à extraire de sous-suite particulière. \square

4

Illustration numérique du modèle MOSAIC

Sommaire

4.1	Introduction	71
4.2	Calculs directs sur le domaine fissuré	72
4.3	Formulation faible du modèle homogénéisé	73
4.4	Résolution numérique par point fixe	75
4.5	Synthèse des approches numériques pour la résolution du modèle MOSAIC	75

4.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous présentons une application numérique de l'approche homogénéisée MOSAIC sur des configurations de milieux périodiques fissurés particulières, correspondant à la Fig. 2.1. Pour des choix de périodes ε qui ne sont pas trop petites (par exemple, $\varepsilon > 0.01$), il est possible d'effectuer le calcul direct de l'équation de la chaleur dans le milieu fissuré à l'aide d'un code aux Eléments Finis. En dessous d'un certain seuil $\varepsilon \sim 0.01$, il devient très difficile de mailler le domaine et le calcul direct n'est plus possible. On peut toutefois effectuer une suite de calculs directs pour des petites valeurs de ε et vérifier que les calculs directs tendent bien vers la solution du problème homogénéisé MOSAIC. Cela donne une illustration numérique pertinente de la méthode d'homogénéisation.

On compare donc la solution du problème de diffusion (2.3) posé sur le domaine Ω_ε contenant la fissure, avec la solution du modèle homogénéisé MOSAIC (2.27)-(2.28)-(2.29) résolu sur le domaine moyen Ω . Ce domaine représente la limite des domaines fissurés Ω_ε lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$. En particulier, le domaine Ω ne contient plus la description directe de la fissure et est invariant selon la direction y , de longueur 2 suivant la direction x . La longueur est donc la même que celle du domaine fissuré Ω_ε , formé d'une partie droite fissurée (sur une largeur unité) et une partie gauche intègre (de largeur unité).

En outre, le modèle homogénéisé ne peut s'écrire sous la forme d'un unique problème aux limites posé sur l'ensemble du domaine Ω . Ceci est lié à l'existence d'une couche limite au voisinage du bord vertical des fissures. Il est alors nécessaire de mettre au point une

stratégie particulière pour résoudre numériquement le problème complet (2.27)-(2.28)-(2.29). Nous avons ainsi développé deux méthodes différentes, qui se distinguent par la manière de traiter la couche limite au bord de la fissure en $x = 0$, à savoir :

- Une formulation faible sur l'ensemble du domaine homogénéisé Ω avec une masse de Dirac en $x = 0$.
- Une approche par point-fixe connectant les deux sous-domaines Ω^+ et Ω^- .

Dans la suite, nous présentons ces deux méthodes de résolution en détail ainsi que les comparaisons par rapport aux calculs directs. Les simulations présentées ici ont été effectuées à l'aide d'un code aux Eléments Finis de type P^1 sur un maillage triangulaire. Pour ce faire, nous nous sommes appuyés sur le logiciel libre FreeFem++ [21].

4.2 Calculs directs sur le domaine fissuré

Nous commençons par résoudre le problème de diffusion (2.3) sur la géométrie fissurée Ω_ε (voir figure 2.1). Nous rappelons que ce domaine est périodique de période ε suivant la direction y . La largeur de la fissure est fixée par le paramètre α . On prend $\alpha = 0.1$ dans le cas de la simulation représentée sur la Fig. 4.1. Dans ce qui suit, nous prenons également $\beta = 0$ pour simplifier l'illustration numérique.

On représente le champ $u(x, y, t_1)$ solution du modèle exact (2.3) au temps $t_1 = 0.5$ pour différentes valeurs de la période ε . Le temps d'observation choisi t_1 est tel que le profil spatial normalisé de la solution n'évolue plus au cours du temps. Les simulations directes sont effectuées pour les périodes $\varepsilon = 1$, $\varepsilon = 0.5$, $\varepsilon = 0.2$, $\varepsilon = 0.02$. Dans chaque cas, nous nous assurons que le calcul est bien convergé vis à vis du pas de temps et du pas spatial de discrétisation choisi. Les champs ainsi calculés sont représentés sur la Fig. 4.1. On remarque que la convergence est assez rapide : par exemple, pour $\varepsilon \leq 0.2$, le champ ne dépend que très faiblement de la variable y et la limite $\varepsilon \rightarrow 0$ semble être presque atteinte. Cela ne s'applique pas au cas $\varepsilon = 1$ où le champ dépend encore clairement de la coordonnée y , particulièrement au voisinage immédiat de la fissure.

En outre, comme la proportion de fissure est relativement faible ici ($\alpha = 0.1$), l'effet de la couche limite en $x = 0$ est faible. On peut alors appliquer la remarque 2.6.1 et comparer la solution du problème direct avec celle du modèle homogénéisé approché (2.30) ne tenant pas compte des conditions de transmission en pointe de fissure. Le modèle moyen approché (2.30) peut être résolu simplement par une méthode aux éléments finis dans le domaine limite Ω où les fissures ne sont plus décrites directement. L'effet des fissures sur le processus de diffusion observé au niveau macroscopique est ainsi modélisé par un terme source de la forme $\alpha \mathbf{1}_{\{x < 0\}}$ présent dans le membre droite de l'équation (2.30). Le flux incident s'appliquant sur la frontière gauche du domaine en $x = -1$ est alors $1 - \alpha$. Cela illustre le processus d'homogénéisation, qui tend à "transformer" une partie du flux incident en un *terme source* au niveau du modèle homogénéisé, et illustre le caractère intuitif du modèle MOSAIC (*Model Of Sinks Averaging Inhomogeneous behavior of Cracked media*).

Remarquons enfin que le modèle homogénéisé approché (2.30) ne prend pas en compte la singularité en $x = 0$, qui joue pourtant un rôle important lorsque la largeur α du domaine fissuré augmente. Il est donc nécessaire de traiter les conditions de transmission en $x = 0$ dans le cas général, pour tout α . Nous exposons alors deux méthodes pour

résoudre numériquement l'effet de la singularité au niveau du modèle homogénéisé.

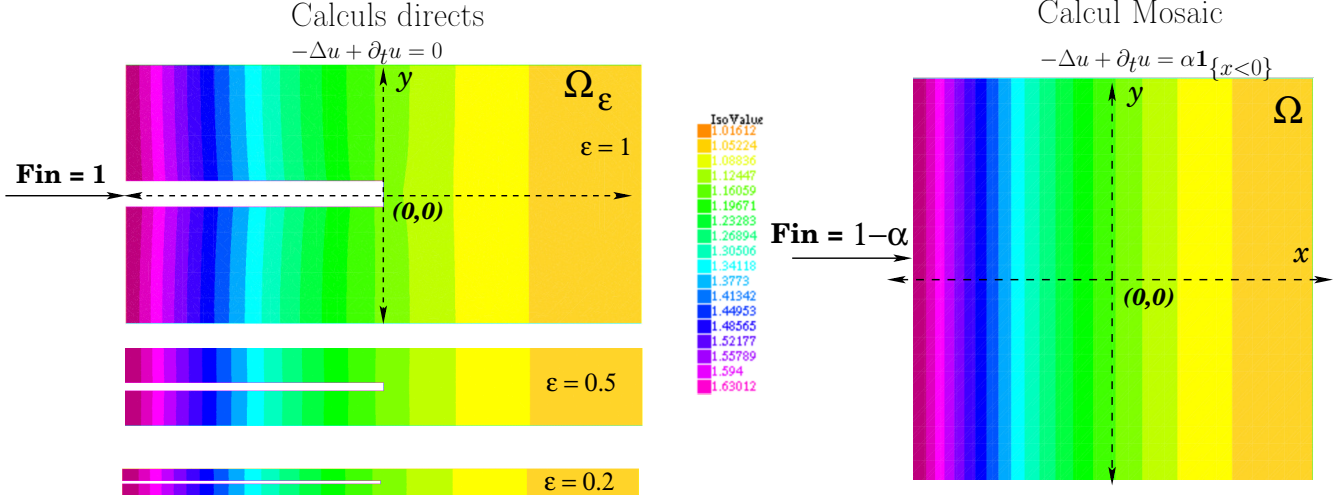


FIGURE 4.1 – Comparaison calculs directs/modèle homogénéisé MOSAIC - Fissuration faible ($\alpha = 0.1$).

La largeur de la fissure vaut $0.1 \times \varepsilon$, où ε est la période du domaine fissuré. La solution numérique du modèle exact (2.3) est représentée à gauche au temps $t_1 = 0.5$. On compare le résultat du calcul direct avec l'approche homogénéisée MOSAIC résolue de manière approchée suivant (2.30).

4.3 Formulation faible du modèle homogénéisé

La première stratégie pour résoudre numériquement le modèle homogénéisé (2.27)-(2.28)-(2.29) est de trouver une formulation faible équivalente du problème, puis de la résoudre en utilisant une méthode aux éléments finis.

Rappelons les équations à résoudre :

$$\begin{cases} -\Delta u + \partial_t u = \alpha - \beta & \text{dans } \Omega^- = \{-1 < x < 0\}, \\ \partial_n u = 1 - \alpha & \text{sur } \{x = -1\}, \\ u \text{ est } 1\text{-périodique en } y. \end{cases} \quad (4.1)$$

$$\begin{cases} -\Delta u + \partial_t u = 0 & \text{dans } \Omega^+ = \{0 < x < 1\}, \\ \partial_n u = 0 & \text{sur } \{x = 1\}, \\ u \text{ est } 1\text{-périodique en } y, \end{cases} \quad (4.2)$$

ainsi que les conditions de transmission écrites $x = 0$, correspondant au fond de la fissure en forme d'indentation :

$$u(x = 0^-) = (1 - \alpha)u(x = 0^+), \quad \partial_x u(x = 0^-) = \partial_x u(x = 0^+) + \beta. \quad (4.3)$$

En multipliant (4.1) par une fonction test v et en intégrant par parties sur le domaine fissuré Ω^- , on obtient :

$$\int_{\Omega^-} \partial_t uv - \Delta vu + \int_{\partial\Omega^-} u \partial_n v - v \partial_n u = (\alpha - \beta) \int_{\Omega^-} v.$$

En utilisant les conditions aux limites sur la frontière du domaine Ω^- , on en déduit :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega^-} \partial_t uv - \Delta vu + \int_{x=-1} u \partial_n v - v(1 - \alpha) + \int_{x=0} u(x = 0^-) \partial_x v - v \partial_x u(0^-) \\ = (\alpha - \beta) \int_{\Omega^-} v. \end{aligned} \quad (4.4)$$

On procède de même sur l'équation (4.2) en intégrant sur le domaine de droite entière Ω^+ . On obtient :

$$\int_{\Omega^+} \partial_t uv - \Delta vu + \int_{\partial\Omega^+} u \partial_n v - v \partial_n u = 0.$$

Les conditions limites donnent :

$$\int_{\Omega^+} \partial_t uv - \Delta vu - \int_{x=1} u \partial_x v + \int_{x=0} \partial_x u(0^+) v - u(x = 0^+) \partial_x v = 0. \quad (4.5)$$

On somme (4.4) et (4.5) :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \partial_t uv - \Delta vu - \int_{x=1} u \partial_x v + \int_{x=-1} u \partial_n v - v(1 - \alpha) \\ + \int_{x=0} v (\partial_x u(0^+) - \partial_x u(0^-)) + (u(x = 0^-) - u(x = 0^+)) \partial_x v = (\alpha - \beta) \int_{\Omega^-} v. \end{aligned}$$

On applique alors les conditions de transmission (4.3) en $x = 0$:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \partial_t uv - \Delta vu - \int_{x=1} u \partial_x v + \int_{x=-1} u \partial_n v - v(1 - \alpha) \\ - \int_{x=0} \beta v - \int_{x=0} \alpha u(x = 0^+) \partial_x v = (\alpha - \beta) \int_{\Omega^-} v. \end{aligned}$$

En intégrant une nouvelle fois par parties, on obtient finalement :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \partial_t uv + \nabla v \nabla u - \int_{x=-1} v(1 - \alpha) \\ - \int_{x=0} \beta v - \int_{x=0} \alpha u(x = 0^+) \partial_x v - (\alpha - \beta) \int_{\Omega^-} v = 0, \end{aligned} \quad (4.6)$$

ce qui correspond à la formulation faible du problème.

L'équation correspondante s'écrit :

$$\begin{cases} -\Delta u + \partial_t u = (\alpha - \beta) \mathbf{1}_{x < 0} \\ -\alpha \partial_x (u(x = 0^+) \delta_{x=0}) + \beta \delta_{x=0} & \text{dans } \Omega = \{-1 < x < 1\}, \\ \partial_n u = 1 - \alpha & \text{sur } \{x = -1\}, \\ \partial_n u = 0 & \text{sur } \{x = 1\}, \\ u \text{ est } 1\text{-périodique en } y. \end{cases} \quad (4.7)$$

En effet, en multipliant les deux membres de la première ligne de (4.7) par une fonction test v , et en intégrant par partie, on retrouve bien chaque terme de (4.6).

Remarque 4.3.1 En prenant $v = 1$ dans (4.6), on fait apparaître l'équation de conservation de l'énergie :

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} u = 1.$$

On calcule alors la solution de (4.6) en utilisant une approximation numérique de la masse de Dirac en $x = 0$:

$$\int_{x=0} \alpha u(x = 0^+) \partial_x v \approx \int_{\Omega} \frac{\alpha}{\delta} \mathbf{1}_{0 < x < \delta} u \partial_x v,$$

pour δ arbitrairement petit. Remarquons que cette approximation risque de ne plus être satisfaisante lorsque α augmente. On peut alors prendre une approximation linéaire par morceaux pour diminuer l'erreur numérique. Cette approche finit malgré tout par s'écarter de la solution directe du problème pour des valeurs d' α élevées (voir Fig 4.3), particulièrement au voisinage de l'interface de la fissure en $x = 0$.

4.4 Résolution numérique par point fixe

Une approche numérique plus précise pour résoudre le modèle homogénéisé (2.27)-(2.28)-(2.29) consiste à utiliser un point fixe, conformément à l'esprit de la remarque 2.7.2 du chapitre 2. Plus précisément, on met en œuvre le schéma itératif suivant :

- Partant d'une valeur initiale F^0 correspondant au flux imposé sur Γ^β , on résout le problème (2.40), pour obtenir l'unique solution $u^{+,0}$ sur le sous-domaine Ω^+ .
- Puis, on calcule la trace g^0 de $(1 - \alpha)u^{+,0}$ sur le bord Γ^β , et on résout (2.39) avec la donnée au bord $g = g^0$. Cela nous donne la solution $u^{-,0}$ sur le sous-domaine Ω^- .
- On remet alors la valeur du flux sur Γ^β $F^1 = \beta - \partial_n u^{-,0}$ et on retourne à la première étape avec la nouvelle estimation du flux F^1 .

Le processus construit alors une suite convergente $(F^n)_{n \in \mathbb{N}}$ dans $L^2(\Gamma^\beta)$, correspondant aux estimations du flux sur Γ^β , ainsi que les suites correspondantes pour les solutions $u^{\pm,n}$ et la donnée au bord g^n . On considère que l'on arrive à convergence lorsque le changement relatif entre deux itérés successifs $\left\| \frac{F^{n+1} - F^n}{F^n} \right\|$ est plus petit qu'un petit paramètre fixé. Cette convergence numérique est répétée à chaque pas de temps de la simulation.

4.5 Synthèse des approches numériques pour la résolution du modèle MOSAIC

On calcule ainsi la propagation de la chaleur suivant chaque méthode :

- calcul direct sur le domaine fissuré Ω_ε ,
- formulation faible sur le domaine moyen Ω ,
- approche par point fixe sur le domaine moyen Ω ,

pour deux géométries extrêmes de milieux fissurés : $\alpha = 0.1$ (faible fissuration) et $\alpha = 0.6$ (forte fissuration). Le paramètre β est fixé à zéro pour simplifier les comparaisons. On compare les différentes méthodes en traçant l'évolution temporelle de la solution obtenue au point $x = 0.5$ (c'est à dire au milieu de la zone non touchée par la fissure) ainsi que le profil spatial de la solution au temps final $t_1 = 0.5$.

Les résultats sont représentés sur les Fig. 4.2 et 4.3. On remarque clairement que la méthode par point fixe est plus précise que la méthode de type formulation faible (4.6), particulièrement lorsque α augmente. Ceci est lié au fait que le modèle (4.6) issu de la formulation faible du problème homogénéisé implique une masse de Dirac en $x = 0$, proportionnelle à la largeur α de la fissure. Ce terme ne peut être qu'approximativement traité dans le modèle numérique résolu par éléments finis. Il s'en suit une erreur de modèle qui peut devenir importante dans le cas d'une forte fissuration (α élevé). D'une certaine manière, l'approche par point fixe permet de traiter exactement la singularité en $x = 0$.

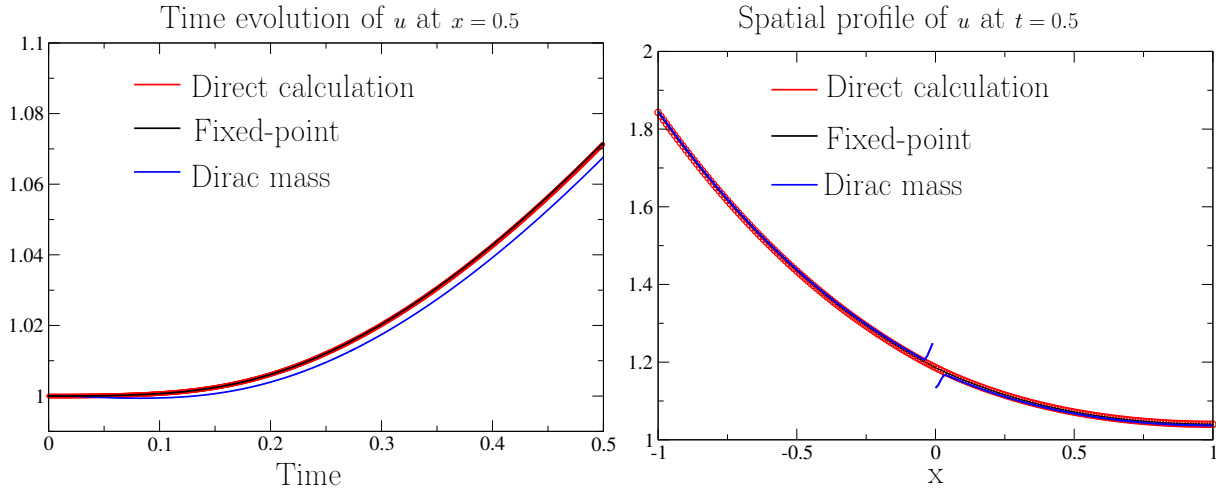


FIGURE 4.2 – Synthèse des approches - Fissuration faible ($\alpha = 0.1$).

La courbe rouge correspond au calcul direct, i.e à la solution de (2.3) lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$. Les deux autres courbes correspondent à la solution du modèle homogénéisé MOSAIC (2.27)-(2.28) résolu suivant deux approches : en noir, il s'agit de la méthode par point fixe ; en bleu, il s'agit de la résolution numérique de la formulation faible (4.6).

On conclut ce chapitre numérique par une étude de l'erreur associée au modèle homogénéisé MOSAIC (2.27)-(2.28)-(2.29) par rapport à la période ε du domaine fissuré. De manière plus précise, on calcule l'erreur définie par :

$$\text{err} = \frac{\|\tilde{u}_\varepsilon - u_\varepsilon\|_{L^2(\Omega_\varepsilon^+)}}{\|u_\varepsilon\|_{L^2(\Omega_\varepsilon^+)}} \quad (4.8)$$

où u_ε est la solution du modèle exact (2.3) évoluant sur le domaine fissuré Ω_ε et \tilde{u}_ε est la projection de la solution u du modèle homogénéisé (2.27)-(2.28)-(2.29) sur le sous-domaine Ω_ε^+ correspondant à la zone non impactée par la fissure. L'erreur est représentée en fonction de la période ε sur la Fig.(4.4). On observe ainsi une dépendance linéaire de l'erreur vis à vis de la période ε du domaine fissuré. En outre, lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$, l'erreur tend

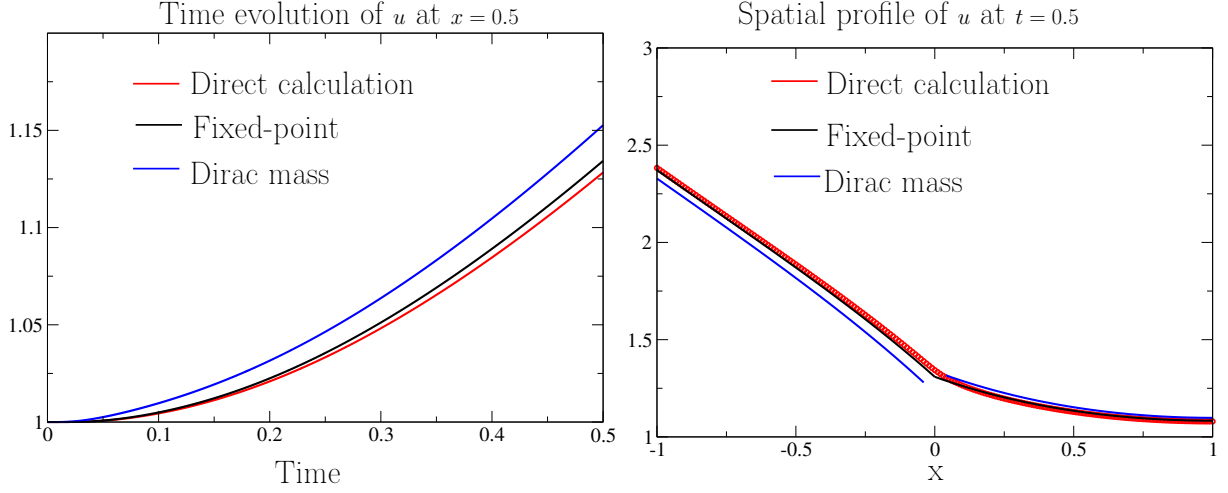


FIGURE 4.3 – Synthèse des approches - Fissuration importante ($\alpha = 0.6$).
 Lorsque l'on se rapproche de $x = 0$, i.e du bord vertical de la fissure à l'interface avec la zone intègre, la résolution numérique de la formulation faible du modèle homogénéisé devient fautive. Ceci tient au fait que la couche limite en $x = 0$ est représentée par une masse de Dirac approchée dans la formulation faible (4.6). Pour une fissuration importante, l'approche par point fixe est préférable (même si elle est plus coûteuse en temps calcul).

vers l'erreur résiduelle liée à au pas spatial des éléments finis employés dans la méthode numérique. L'erreur de modèle tend donc bien vers 0.

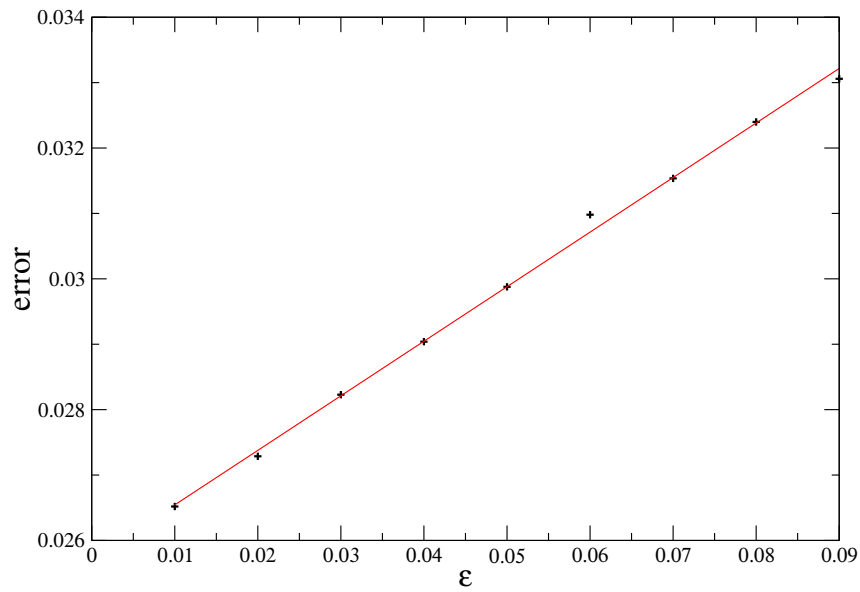


FIGURE 4.4 – Erreur numérique associée au modèle homogénéisé en fonction de la période ε

L'erreur dépend linéairement de la période ε . Lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$, l'erreur tend vers une erreur résiduelle liée au pas fini de la discrétisation spatiale employée dans le calcul d'éléments finis, valant ~ 0.02 ici.

5

Extensions à des configurations fissurées aléatoires

Sommaire

5.1	Géométrie aléatoire	80
5.1.1	Problème exact	80
5.2	Changement d'échelle	81
5.2.1	Développement asymptotique	81
5.3	Formulation du problème homogénéisé	83
5.4	Structure multi-échelle du problème final	83
5.5	Illustration numérique	84

Nous avons montré aux chapitres précédents que le processus de diffusion initié par un flux incident sur un milieu fissuré périodique pouvait être modélisé par un terme source volumique dans une équation de la chaleur homogénéisée posée dans un domaine moyen, ne contenant plus la description directe des fissures. La géométrie de fissure considérée - sous la forme d'une indentation - induit une singularité au voisinage du bord vertical, que l'on modélise par une couche limite donnant lieu à l'existence de conditions de transmission dans la formulation du problème homogénéisé. On peut alors chercher à étendre la méthode à des configurations de milieux fissurés plus complexes.

Une première extension possible est de considérer que la largeur des fentes n'est plus périodique mais décrite par une variable aléatoire α_i . Nous proposons ici une première analyse de cette problématique aléatoire, en raisonnant de manière formelle et intuitive. Cela nous permet d'établir la structure du modèle homogénéisé, différente du cas périodique.

Insistons bien sur le fait que les résultats présentés dans ce chapitre ne constituent que des conjectures formelles, obtenues en raisonnant de manière nécessaire sur la base du développement asymptotique. Une justification rigoureuse est en cours d'élaboration dans le travail en préparation [A2].

5.1 Géométrie aléatoire

On considère pour une forme de fissure différente de la précédente (voir Fig. 5.1) : les interfaces sont penchées et se rejoignent en une pointe localisée en $x = 0$. Dans ce cas, on montre que la couche limite en $x = 0$ disparaît. Nous allons montrer que, si le milieu redevient périodique (α_i constant), l'équation homogénéisée prend alors simplement la forme d'une équation de la chaleur perturbée par la présence d'un terme source et d'une modification de la conductivité effective.

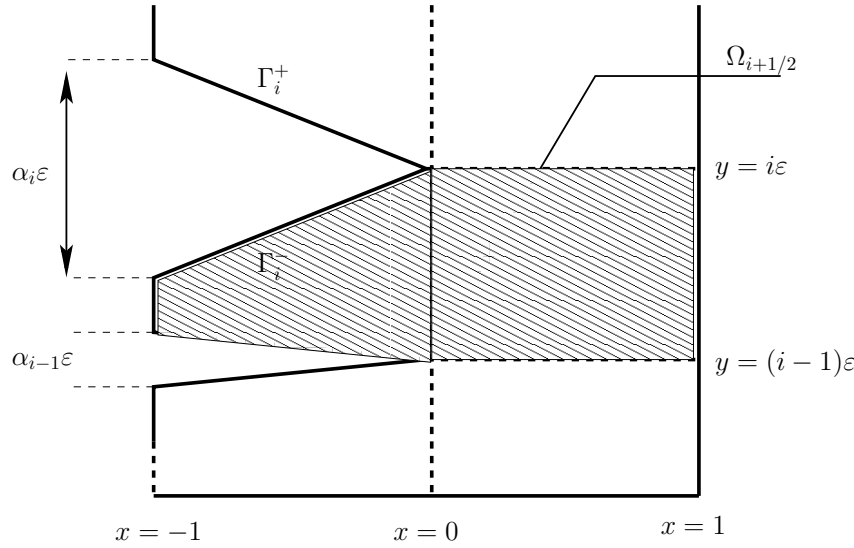


FIGURE 5.1 – Le milieu fissuré non-périodique et le motif élémentaire $\Omega_{i+1/2}$.

On définit la longueur des interfaces penchées :

$$l_\varepsilon^i = \sqrt{1 + \frac{\alpha_i^2 \varepsilon^2}{4}}.$$

5.1.1 Problème exact

Pour le cas des fissures en pointe, le modèle de diffusion exact s'écrit :

$$\begin{cases} \partial_t u_\varepsilon - \Delta u_\varepsilon = 0 & \text{dans } \Omega_\varepsilon, \\ \partial_n u_\varepsilon = 0 & \text{pour } x = 1 \\ \partial_n u_\varepsilon = 1 & \text{pour } x = -1, \\ \partial_n u_\varepsilon = \frac{\alpha_i \varepsilon}{2l_\varepsilon^i} & \text{sur } \Gamma_\varepsilon^{i+}, \Gamma_\varepsilon^{i-}. \end{cases} \quad (5.1)$$

avec la condition initiale

$$u_\varepsilon(x, y, t = 0) = u^0(x, y), \quad (5.2)$$

de manière à ce que le problème soit bien posé.

5.2 Changement d'échelle

Comme précédemment, on commence par mettre à l'échelle la solution du problème exact u_ε en définissant :

$$u_\varepsilon(t, x, y) = v_\varepsilon(t, x, \frac{y}{\varepsilon}), \quad (5.3)$$

le changement d'échelle étant effectué par rapport à la variable y , direction suivant laquelle l'échelle microscopique se manifeste. v_ε vérifie le problème exact suivant :

$$\begin{cases} \partial_t v_\varepsilon - \partial_x^2 v_\varepsilon - \frac{1}{\varepsilon^2} \partial_y^2 v_\varepsilon = 0 & \text{dans } \Omega_1, \\ \partial_x v_\varepsilon = 0 & \text{pour } x = 1 \\ \partial_x v_\varepsilon = -1 & \text{pour } x = -1, \\ \frac{\alpha_i}{2} \partial_x v_\varepsilon + \frac{1}{\varepsilon^2} \partial_y v_\varepsilon = -\frac{\alpha_i}{2} & \text{sur } \Gamma_1^{i+}, \\ -\frac{\alpha_i}{2} \partial_x v_\varepsilon + \frac{1}{\varepsilon^2} \partial_y v_\varepsilon = \frac{\alpha_i}{2} & \text{sur } \Gamma_1^{i-}. \end{cases} \quad (5.4)$$

5.2.1 Développement asymptotique

Il semble ainsi naturel de rechercher une solution v_ε du problème (5.4) sous la forme :

$$v_\varepsilon(x, y, t) = v_0(x, y, t) + \varepsilon^2 v_1(x, y, t) + \varepsilon^4 v_2(x, y, t) + \dots \quad (5.5)$$

Nous injectons alors l'ansatz (5.5) dans le système (5.4) et nous identifions les différentes puissances de ε^2 , faisant ainsi apparaître la cascade d'équations suivante :

– A l'ordre ε^{-2} :

L'identification des termes en ε^{-2} dans le système (5.4) donne $\partial_y^2 v_0 = 0$, dans le domaine fissuré et $\partial_y v_0 = 0$, sur Γ_i^\pm .

Ainsi, dans le domaine $\Omega_{i+1/2}$ défini sur la Fig 5.1, on a : $\partial_y^2 v_0 = 0$ pour $x < 0$, avec $\partial_y v_0 = 0$, sur Γ_i^\pm .

Cela implique que :

$$\partial_y v_0 = 0 \text{ pour } x < 0.$$

Par ailleurs, pour $x > 0$, on a $\partial_y^2 v_0 = 0$ sur $\bigcup_i \Omega_{i+1/2}$. Ceci implique, compte tenu des conditions périodiques (ou de flux nuls) imposées sur les bords extrêmes horizontaux, que $\partial_y v_0 = 0$ sur tout le domaine fissuré. Ainsi :

$$\begin{cases} v_0 = v_0(t, x) & \text{pour } x > 0 \\ v_0 = v_0^{i+1/2}(t, x) & \text{sur } \Omega_{i+1/2} \cap \{x < 0\} \end{cases} \quad (5.6)$$

Remarquons que v_0 dépend de i sur la partie $\{x < 0\}$ à cause de la présence des fissures de largeur aléatoire α_i et α_{i+1} .

– A l'ordre ε^0 :

$$\begin{cases} \partial_t v_0^{i+1/2} - \partial_x^2 v_0^{i+1/2} - \partial_y^2 v_1^{i+1/2} = 0 & \text{dans } \Omega_{i+1/2}, \\ \partial_x v_0^{i+1/2} = 0 & \text{pour } x = 1 \\ \partial_x v_0^{i+1/2} = -1 & \text{pour } x = -1 \\ \frac{\alpha_i}{2} \partial_x v_0^{i+1/2} + \partial_y v_1^{i+1/2} = -\frac{\alpha_i}{2} & \text{sur } \Gamma_i^+, \\ -\frac{\alpha_i}{2} \partial_x v_0^{i+1/2} + \partial_y v_1^{i+1/2} = \frac{\alpha_i}{2} & \text{sur } \Gamma_{i+1}^-. \end{cases} \quad (5.7)$$

On intègre ensuite la première équation du système (5.7) en tenant compte du fait que v_0 ne dépend pas de y , on trouve :

$$(1 + \mathbf{1}_{\{x < 0\}} \alpha_{i+1/2} x) \partial_t v_0^{i+1/2} - (1 + \mathbf{1}_{\{x < 0\}} \alpha_{i+1/2} x) \partial_x^2 v_0^{i+1/2} - \int \partial_y^2 v_1^{i+1/2} dy = 0. \quad (5.8)$$

On étudie ensuite plus précisément l'équation (5.8) dans les parties fissurées ($\{x < 0\}$) ou intègres ($\{x > 0\}$) respectivement :

- Pour $\{x > 0\}$: Sur cette partie, $v_0^{i+1/2}$ est indépendant de i : $v_0^{i+1/2} = v_0$. On peut directement intégrer sur tout domaine complet ($\bigcup_i \Omega_{i+1/2}$), formé de la juxtaposition⁶ de $\frac{1}{\varepsilon}$ sous-domaines fissurés de taille⁷ 1 :

$$\frac{1}{\varepsilon} (\partial_t v_0 - \partial_x^2 v_0) = \partial_y v_1(t, x, \frac{1}{2\varepsilon}) - \partial_y v_1(t, x, -\frac{1}{2\varepsilon}) = 0,$$

en appliquant les conditions de périodicité (ou de flux nuls) imposées sur les bords extrêmes horizontaux.

Donc, sur la partie $x > 0$, $v_0^{i+1/2} = v_0$ vérifie :

$$\partial_t v_0 - \partial_x^2 v_0 = 0. \quad (5.9)$$

- Pour $\{x < 0\}$: Dans cette partie, v_0 dépend du sous domaine $\Omega_{i+1/2}$ considéré. On peut alors expliciter le troisième terme de (5.8) de la manière suivante :

$$\int \partial_y^2 v_1^{i+1/2} dy = \partial_y v_1^{i+1/2}(t, x, \underbrace{i+1 + x \frac{\alpha_{i+1}}{2}}_{\Gamma_{i+1}^-}) - \partial_y v_1^{i+1/2}(t, x, \underbrace{i - x \frac{\alpha_i}{2}}_{\Gamma_i^+})$$

Soit, en utilisant les conditions limites sur les bords $\Gamma_{i+1}^-, \Gamma_i^+$:

$$\int \partial_y^2 v_1^{i+1/2} dy = \frac{\alpha_i + \alpha_{i+1}}{2} + \frac{\alpha_i + \alpha_{i+1}}{2} \partial_x v_0^{i+1/2}(t, x).$$

Ainsi, en définissant $\alpha_{i+1/2} = \frac{\alpha_i + \alpha_{i+1}}{2}$, on a, pour $x < 0$:

$$(1 + \alpha_{i+1/2} x) (\partial_t v_0^{i+1/2} - \partial_x^2 v_0^{i+1/2}) - \frac{\alpha_i + \alpha_{i+1}}{2} \partial_x v_0^{i+1/2}(t, x) = \frac{\alpha_i + \alpha_{i+1}}{2},$$

que l'on peut récrire sous la forme :

$$(1 + \alpha_{i+1/2} x) \partial_t v_0^{i+1/2} - (1 + \alpha_{i+1/2} x) \partial_x^2 v_0^{i+1/2} - \alpha_{i+1/2} \partial_x v_0^{i+1/2} = \alpha_{i+1/2}.$$

6. Ici encore, on suppose que $\frac{1}{\varepsilon}$ est un entier.

7. Puisque les sous-domaines fissurés microscopiques de taille ε ont été mis à l'échelle, conformément à l'équation (5.3) reliant u et v .

5.3 Formulation du problème homogénéisé

On a donc finalement :

$$\begin{cases} (1 + \alpha_{i+1/2}x\mathbf{1}_{x<0}) \partial_t v_0^{i+1/2} - \partial_x \left((1 + \alpha_{i+1/2}x\mathbf{1}_{x<0}) \partial_x^2 v_0^{i+1/2} \right) = \alpha_{i+1/2} \mathbf{1}_{x<0} \\ \partial_x v_0^{i+1/2} = 0 \text{ pour } x = 1 \\ \partial_x v_0^{i+1/2} = -1 \text{ pour } x = -1. \end{cases} \quad (5.10)$$

On peut aussi écrire l'équation sur $w_0^{i+1/2} = (1 + \alpha_{i+1/2}x\mathbf{1}_{x<0}) v_0^{i+1/2}$:

$$\begin{cases} \partial_t w_0^{i+1/2} - \partial_x \left[(1 + \alpha_{i+1/2}x\mathbf{1}_{x<0}) \partial_x \left(\frac{w_0^{i+1/2}}{1 + \alpha_{i+1/2}x\mathbf{1}_{x<0}} \right) \right] = \alpha_{i+1/2} \mathbf{1}_{x<0} \\ \partial_x w_0^{i+1/2} = 0 \text{ pour } x = 1 \\ \partial_x w_0^{i+1/2} = 1 - \alpha_{i+1/2} \text{ pour } x = -1. \end{cases} \quad (5.11)$$

5.4 Structure multi-échelle du problème final

Ainsi, pour trouver la solution homogénéisée, il faut résoudre, pour chaque valeur possible de la largeur de fente $\alpha_{i+1/2}$, un problème de diffusion 1D dit microscopique, de type (5.10) ou (5.11), avec un terme source et un coefficient de diffusion perturbé. L'équation microscopique correspond en fait à l'équation limite du cas périodique, où $\alpha_{i+1/2}$ est constant.

A partir de la résolution de chaque problème microscopique sur chaque sous-domaine $\Omega_{i+1/2}$, on reconstruit donc la solution \bar{u} à l'échelle macroscopique, définie comme étant la limite des solution u_ε du problème exact initial (5.1) :

$$\bar{u} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} u_\varepsilon,$$

soit encore, en utilisant la relation entre u_ε et v_ε , et en approchant v_ε par v_0 :

$$\bar{u} \approx \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} v_0(t, x, \frac{y}{\varepsilon}),$$

avec :

$$v_0(t, x, \frac{y}{\varepsilon}) = \sum_i v_0^{i+1/2}(t, x) \mathbf{1}_{\{i\varepsilon \leq y \leq (i+1)\varepsilon\}}, \quad (5.12)$$

L'équation (5.12) s'interprète ainsi comme une espérance :

$$\bar{u} = \mathbb{E} \left((1 + \alpha_{i+1/2}x\mathbf{1}_{x<0}) v_0^{i+1/2}(t, x) \right), \quad (5.13)$$

ou encore, en fonction des fonctions $w_0^{i+1/2}$,

$$\bar{u} = \mathbb{E} \left(w_0^{i+1/2}(t, x) \right). \quad (5.14)$$

où chaque fonction $v_0^{i+1/2}$ (ou de manière équivalente $w_0^{i+1/2}$) est solution du problème microscopique (5.10) sur le sous-domaine fissuré $\Omega_{i+1/2}$.

Remarque 5.4.1 Dans le cas périodique, les fonctions $v_0^{i+1/2}$ (ou $w_0^{i+1/2}$) deviennent indépendantes de i . On retrouve alors l'équation limite sur $u = \bar{u}$:

$$\begin{cases} \partial_t u - \partial_x \left[(1 + \alpha x \mathbf{1}_{x < 0}) \partial_x \left(\frac{u}{1 + \alpha x \mathbf{1}_{x < 0}} \right) \right] = \alpha \mathbf{1}_{x < 0} \\ \partial_x u = 0 \text{ pour } x = 1 \\ \partial_x u = 1 - \alpha \text{ pour } x = -1. \end{cases} \quad (5.15)$$

On retrouve bien les caractéristiques du modèle homogénéisé MOSAIC, à savoir un problème de diffusion 1D avec un flux entrant modifié et un terme source. La forme de l'équation limite diffère toutefois du cas où les fissures ont la forme d'indentation avec un bord vertical en $x = 0$. En particulier, il n'y a plus de couche limite en $x = 0$: la forme en pointe induit une variation continue de la solution et de son gradient au voisinage de la pointe. Par ailleurs, l'effet des fissures se manifeste au niveau de l'équation homogénéisée non seulement sous la forme d'un terme source (comme c'était le cas pour le cas des fissures droites), mais aussi par une perturbation de la conductivité.

Remarque 5.4.2 Dans le cas aléatoire, il n'est pas possible d'écrire une équation limite sur \bar{u} , qui doit être calculée suivant une espérance à partir des solutions des différents problèmes microscopiques correspondant aux valeurs possibles de $\alpha_{i+1/2}$. La structure du problème final reste donc multi-échelle et ne peut se récrire sous la forme d'une équation moyenne écrite à l'échelle macroscopique, comme cela était le cas pour le milieu fissuré périodique.

5.5 Illustration numérique

On se propose dans cette partie d'illustrer la méthode de calcul de la solution homogénéisée \bar{u} dans le cas d'un milieu fissuré caractérisé par une largeur de fissure aléatoire. Pour simplifier, on considère que la largeur des fissures α est une variable aléatoire discrète ne pouvant prendre que deux valeurs, 0.6 ou 0.4, avec une probabilité 1/2. La solution moyenne \bar{u} s'obtient alors en deux temps :

- On résout le problème microscopique (5.10) pour chaque valeur possible de $\alpha_{i+1/2}$.
- On calcule l'espérance selon (5.13) à partir des solutions $v_0^{i+1/2}$ précédemment obtenues.

Pour des valeurs de α pas trop proches de 0 ou de 1, il est également possible d'effectuer une simulation directe sur une réalisation du milieu aléatoire, représentée sur la Fig. 5.2. On représente ainsi sur la Fig. 5.2 la solution numérique directe de (5.4) pour une petite valeur fixée de ε ⁸.

On compare alors les trois solutions correspondant à trois approches distinctes :

- la solution du calcul direct,
- la solution moyenne \bar{u} , correspondant à l'espérance (5.13) des solutions des problèmes microscopiques (5.10),

8. En pratique, on ne peut pas prendre un ε trop petit pour que le domaine puisse être maillé. Pour les simulations directes effectuées, on ne peut descendre en dessous de $\varepsilon \sim 0.1$.

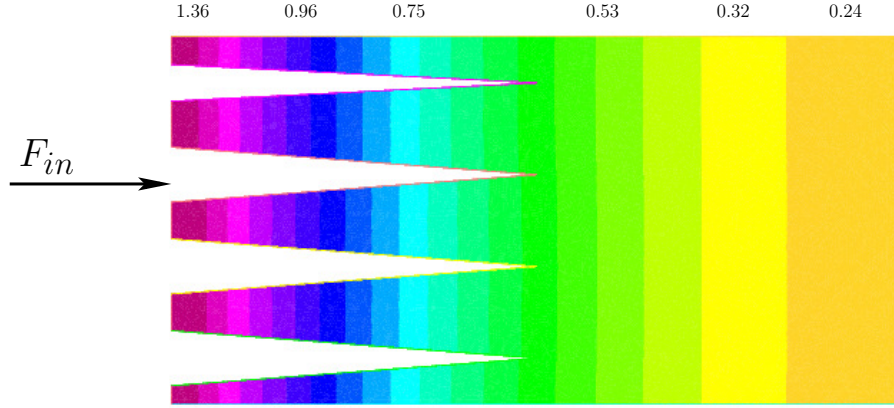


FIGURE 5.2 – Résolution directe de l'équation de diffusion dans un milieu fissuré aléatoire

La solution est ici représentée au temps $t = 1$, à un instant où le profil spatial (normalisé) a atteint un état quasi-stationnaire. On considère ici une réalisation possible du milieu fissuré où la largeur des fentes α est une variable aléatoire discrète pouvant prendre deux valeurs $\{0.4, 0.6\}$ avec une probabilité $1/2$.

- la solution du problème homogénéisé correspondant au cas périodique où $\alpha = \mathbb{E}(\alpha_{i+1/2})$.

Les profils spatiaux associés à chaque solution sont représentés sur la Fig. 5.3. L'instant considéré est tel que les profils normalisés ont atteint un état stationnaire. La solution directe et la solution moyenne calculées suivant l'espérance (5.13) sont en très bon accord. En revanche, la solution du problème homogénéisé correspondant au cas périodique avec $\alpha = \mathbb{E}(\alpha_{i+1/2})$ dévie significativement de la solution du problème aléatoire. Ainsi, la solution moyenne ne correspond pas à l'équation moyenne du cas périodique avec une largeur de fissure prise égale à la valeur moyenne des $\alpha_{i+1/2}$, ce qui aurait pu être intuitif. Ceci illustre bien que l'on ne peut obtenir la solution moyenne comme la solution d'une équation limite. La structure du couplage multi-échelle est donc ici significativement différente du cas périodique.

Remarque 5.5.1 *Dans le cas (plus réaliste) où la variable aléatoire α suit une loi continue, la seule alternative est d'avoir recours à une méthode de type Monte Carlo en tirant aléatoirement des réalisations pour α . Pour chaque réalisation $\alpha_{i+1/2}$, on résout le problème microscopique (5.10). On estime alors la solution homogénéisée \bar{u} en calculant la moyenne d'échantillonnage des solutions ainsi obtenues.*

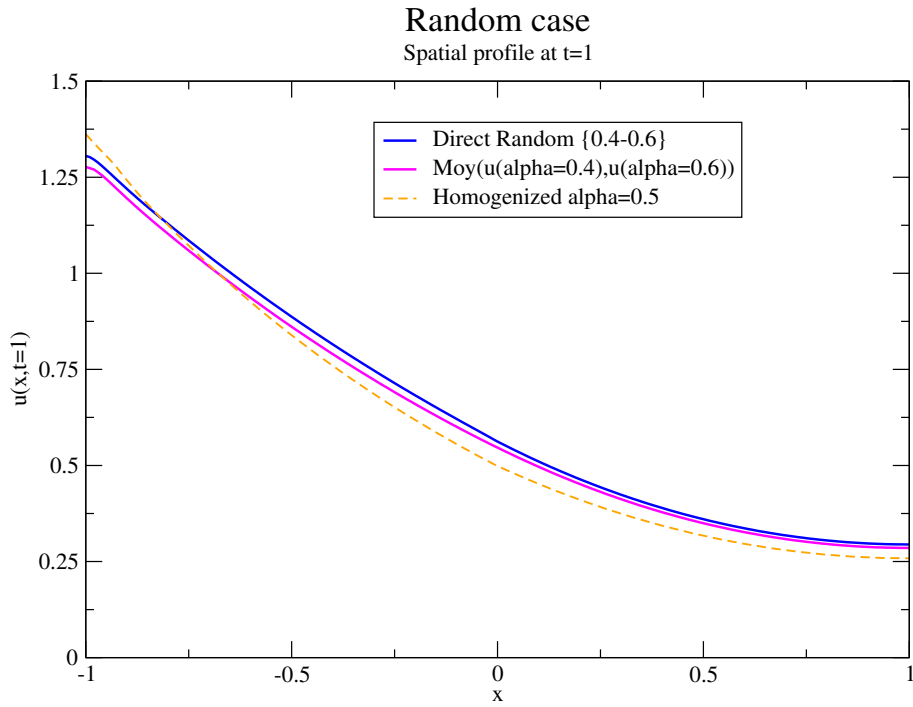


FIGURE 5.3 – Comparaison des approches de résolution dans le cas aléatoire.

En bleu : calcul direct sur une réalisation du milieu fissuré aléatoire où la largeur des fissures α prend aléatoirement les valeurs 0.4 et 0.6 avec une probabilité 1/2 ; magenta : solution homogénéisée calculée comme une espérance des solutions des problèmes microscopiques (5.10) résolus pour chaque valeur de α possible ($\alpha = 0.4$ ou $\alpha = 0.6$) ; en pointillés oranges : solution homogénéisée du problème périodique avec un paramètre de largeur $\alpha_0 = \mathbb{E}(\alpha) = 0.5$.

6

Bornes sur la conductivité effective de milieux hétérogènes non-linéaires

6.1 Motivations

On cherche à étendre l'approche homogénéisée MOSAIC en vue de traiter des cas de milieux fissurés plus complexes, pouvant par exemple contenir des porosités distribuées aléatoirement, et sur lesquelles aucun rayonnement n'est appliqué (voir Fig. 6.1 pour une illustration). Le milieu fissuré hétérogène est alors caractérisé par deux échelles spatiales :

- $\alpha\varepsilon$ correspondant à la largeur des fissures, sur lesquelles est appliqué un flux incident (représenté par les flèches bleues sur la Fig. 6.1),
- $\eta \ll \varepsilon$ qui est la taille des hétérogénéités, significativement plus petite que la taille des fissures.

Pour modéliser la diffusion de la chaleur dans un tel milieu, on peut avoir recours à un couplage entre la méthode de type MOSAIC permettant d'homogénéiser l'effet des fissures de taille $\alpha\varepsilon$, avec une approche en bornes pour encadrer le comportement effectif des hétérogénéités aléatoirement distribuées.

Pourvu que la taille des hétérogénéités soit beaucoup plus petite que la période ε des fissures principales, la loi effective du milieu fissuré hétérogène peut être estimée, et dans certains cas rigoureusement bornée, en appliquant des méthodes générales issues de la théorie de l'homogénéisation appliquée aux milieux composites. On cherche alors à établir des bornes optimales sur le comportement effectif à partir des informations disponibles relatives à la statistique du milieu.

Considérons un milieu hétérogène formé de deux phases, chacune caractérisée par une conductivité γ_1 et γ_2 et des fractions volumiques c_1 et c_2 . On cherche à estimer au mieux la conductivité effective γ_{eff} du milieu hétérogène, définie par une relation du type :

$$\mathbf{q} \sim \gamma_{eff} \mathbf{g}, \quad (6.1)$$

où \mathbf{q} est le flux de chaleur local et \mathbf{g} le gradient de température. Les propriétés effectives d'un milieu hétérogène dépendent des propriétés de chaque phase constitutive et de la micro-structure. Notons bien que le comportement effectif d'un milieu hétérogène dépend de manière complexe du détail de la micro-structure et ne se réduit en général

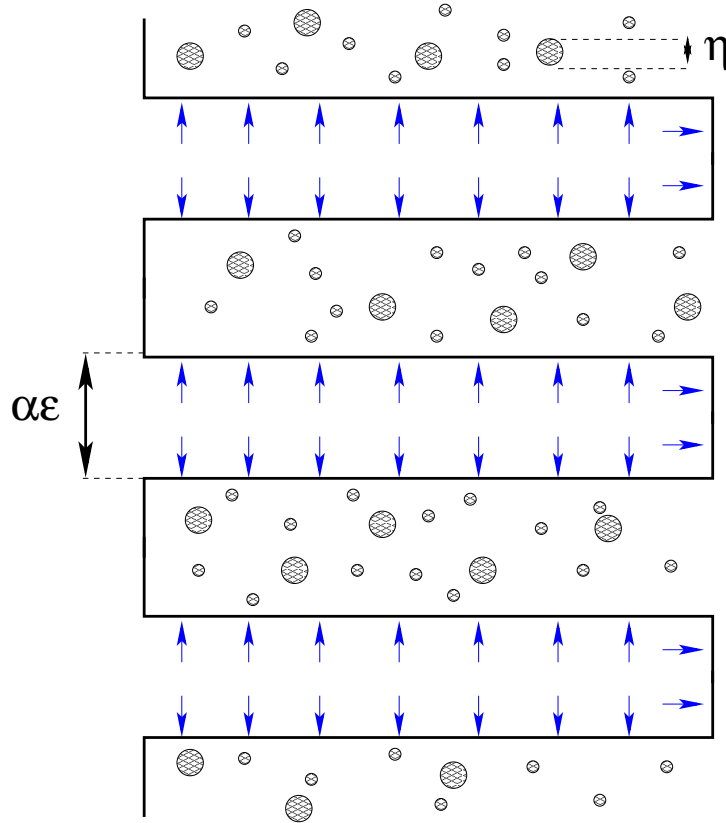


FIGURE 6.1 – Exemple de milieux fissuré hétérogène.

Le milieu fissuré hétérogène est caractérisé par deux échelles spatiales : $\alpha\epsilon$ correspondant à la largeur des fissures, sur lesquelles est appliqué un flux incident (représenté par les flèches bleues), et $\eta \ll \epsilon$ qui est la taille des hétérogénéités aléatoirement distribuées.

pas à une moyenne simple pondérée par les fractions volumiques des phases constitutives. Considérons par exemple un matériau hétérogène contenant des inclusions formées d'un matériau 1 supposé conducteur de la chaleur (représenté en gris sur la Fig. 6.2) immergées dans une matrice constituée d'un matériau de type 2 supposé isolant (représenté en blanc sur la Fig. 6.2). Supposons que les fractions volumiques associées aux deux phases soient égales. A partir de ce milieu (représenté à gauche sur la Fig. 6.2), on construit le milieu hétérogène *complémentaire*, constitué à partir d'une matrice de matériau conducteur 1 contenant des inclusions de matériau 2 (représenté à droite sur la Fig. 6.2). Intuitivement, on pressent que la conductivité du milieu complémentaire (à droite sur la Fig. 6.2) soit caractérisé par une conductivité effective plus importante, la phase "connectée" (ou matrice) étant la phase conductrice. Pourtant, les deux milieux hétérogènes sont caractérisés par des fractions volumiques identiques.

Un autre exemple bien connu illustrant l'influence de la micro-structure sur les propriétés effectives est celui de la conductivité considérée dans des matériaux composites laminés, représentés sur la Fig. 6.3. Ces configurations particulières atteignent les bornes dites de Voigt et Reuss correspondant aux moyennes arithmétiques et harmoniques des conductivités des phases pures pondérées par les fractions volumiques. Suivant l'orien-

tation du gradient de température par rapport aux strates du matériau, la conductivité effective varie de manière importante.

Ces exemples simples montrent donc que les propriétés effectives dépendent d'informations plus riches que de la simple connaissance des fractions volumiques. Le comportement effectif dépend étroitement des données relatives à la surface des interfaces, à l'orientation des inclusions, à leur taille, leur forme, la connectivité des phases... De manière plus quantitative, le détail de la micro-structure est caractérisé par les fonctions de corrélation à n -points qui offrent une description statistique du milieu multi-échelle. Toutefois, les propriétés effectives dépendent en général d'un nombre infini de fonctions de corrélation. On ne peut donc en pratique caractériser complètement la micro-structure. Il est alors nécessaire d'avoir recours à une approche en *bornes* pour estimer les propriétés effectives de manière rigoureuse à partir des informations connues sur la statistique du milieu hétérogène.

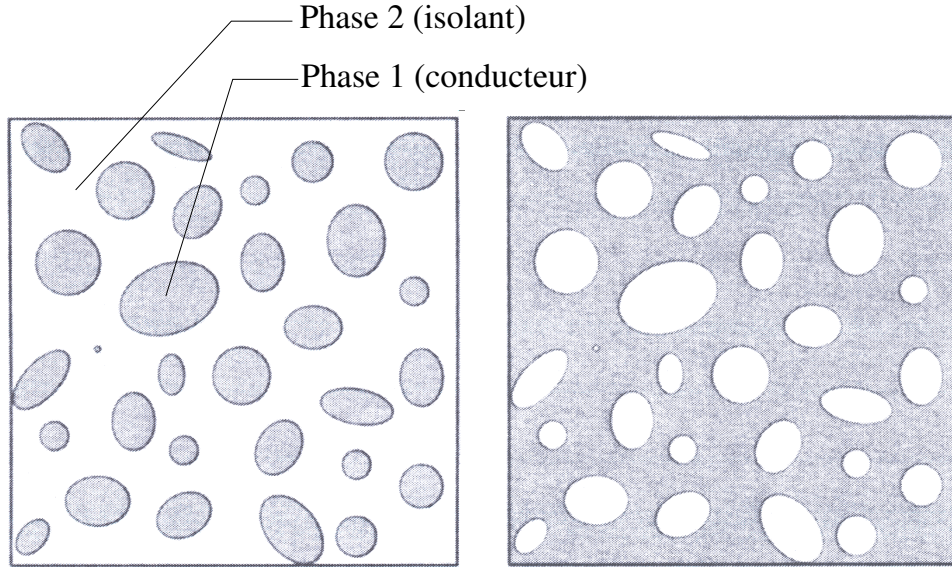


FIGURE 6.2 – Matériaux composites hétérogènes.

Ces deux milieux hétérogènes sont tous deux constitués des mêmes phases en des proportions égales. Pourtant, leurs propriétés effectives sont clairement très différentes : le milieu formé de la matrice conductrice est caractérisé par une conductivité effective plus élevée. Ainsi, les fractions volumiques ne suffisent pas à caractériser le comportement effectif d'un milieu hétérogène.

La question naturelle qui se pose alors est de savoir si, pour un niveau d'information donné, une borne est optimale ou si elle est peut être améliorée.

Dans le cadre des milieux hétérogènes isotropes caractérisés par une loi de comportement linéaire, l'optimalité des bornes de Hashin-Shtrikman [22] est établie [29], [32], [20]. Les bornes de Hashin-Shtrikman sur la conductivité sont par exemple atteintes dans une géométrie de type assemblage de sphères tapissées. De manière plus précise, en supposant que $\gamma_2 > \gamma_1$, on considère des sphères remplies de matériau 1, tapissées par des coquilles remplies de matériaux 2. Les rayons des sphères et des coquilles externes sont choisis de

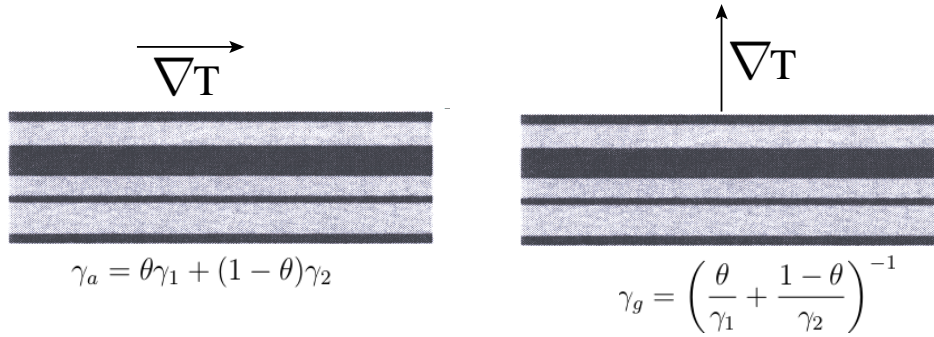


FIGURE 6.3 – Matériaux composites laminés atteignant les bornes de Voigt et Reuss. Lorsque le gradient de température est parallèle aux couches du matériau laminé, la conductivité effective correspond exactement à la moyenne arithmétique des conductivités de chaque phase, pondérée par les fractions volumiques θ et $1 - \theta$. Lorsque le gradient de température est transverse, la conductivité effective correspond à la moyenne harmonique.

telle manière que les fractions volumiques de chaque phase correspondent bien aux valeurs fixées c_1 et c_2 . L'assemblage de sphères ainsi constitué doit recouvrir le plan, ce qui impose des rayons de sphères variables, distribués de manière continue et pouvant atteindre des valeurs infinitésimales.

La conductivité effective de cet assemblage particulier correspond alors à la borne haute d'Hashin-Shtrikman. Si l'on considère des sphères de matériau 2 tapissées par des coquilles externes formées de matériau 1, alors la borne inférieure d'Hashin-Shtrikman est atteinte. Ceci illustre l'optimalité des bornes d'Hashin-Shtrikman pour les milieux hétérogènes linéaires 2D isotropes. Cela signifie que les bornes sont les plus fines possibles, compte tenu de l'information disponible (ici, les fractions volumiques).

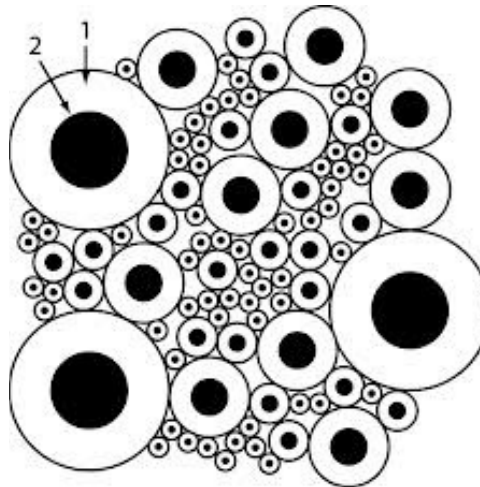


FIGURE 6.4 – Assemblage de sphères tapissées atteignant la borne de Hashin-Shtrikman. Ici, les sphères de matériau 2 sont tapissées de coquilles de matériau 1. En supposant $\gamma_2 > \gamma_1$, cette micro-structure atteint la borne inférieure de Hashin-Strickman pour la conductivité effective.

En revanche, pour les lois de comportement non-linéaires, différentes bornes ont été proposées et améliorées à plusieurs reprises ([46], [39], [38]). Néanmoins, leur optimalité n'est pas démontrée de sorte qu'il est a priori possible de raffiner les estimations existantes.

Dans ce chapitre, on se propose de décrire une nouvelle méthode pour calculer des bornes sur la conductivité effective de milieux hétérogènes isotropes dont la loi de comportement est non-linéaire. On s'appuie pour cela sur la méthode, dite de translation [31], qui est en fait liée à la méthode d'énergie ou de "compacité par compensation" [34], [43] introduite par F. Murat et L. Tartar dans le cadre de l'homogénéisation stochastique.

Après avoir rappelé les résultats relatifs à l'homogénéisation stochastique en régime linéaire et l'établissement des bornes de Hashin-Shtrikman pour le problème de la conductivité, on considère le cas des milieux hétérogènes caractérisés par une loi de comportement non-linéaire (en fonction puissance). On expose alors une méthode originale aboutissant à de nouvelles bornes sur la conductivité effective applicable à des milieux hétérogènes non-linéaires 2D isotropes. L'approche est basée sur la méthode de translation, dont on rappellera les principales caractéristiques. On couple ensuite la méthode de translation à l'idée d'immersion, consistant à dupliquer artificiellement l'espace dans lequel le problème physique est posé. Nous montrerons que cette stratégie d'accroître artificiellement la dimension du problème, est susceptible de faire apparaître de nouvelles bornes, potentiellement meilleures que les estimations existantes.

Ce chapitre correspond au travail en cours [A3].

6.2 Homogénéisation stochastique en régime linéaire

Revenons sur le problème général de la conductivité linéaire :

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(A_\varepsilon \nabla u_\varepsilon) = f \text{ dans } \Omega \\ u_\varepsilon = 0 \text{ sur } \partial\Omega \end{cases} \quad (6.2)$$

où A_ε vérifie l'hypothèse de coercivité, c'est à dire qu'il existe deux réels α, β , $0 < \alpha < \beta$, tels que :

$$\begin{cases} (A_\varepsilon \gamma, \gamma) \geq \alpha \|\gamma\|^2 \\ \|A_\varepsilon(x) \gamma\| \leq \beta \|\gamma\| \end{cases} \quad (6.3)$$

On désigne par $M(\alpha, \beta, \Omega)$ l'ensemble des matrices vérifiant l'hypothèse de coercivité. Le premier chapitre de la première partie traitait le cas d'un milieu composite périodique et linéaire. On cherche dans ce chapitre à aborder le problème de conductivité pour un milieu non-périodique.

Dans le cas général (pas nécessairement périodique), on sait qu'il est possible de trouver une sous-suite extraite telle que :

$$\begin{cases} i) & u_{\varepsilon'} \rightharpoonup u_0 \text{ faiblement dans } H_0^1(\Omega) \\ ii) & A_{\varepsilon'} \nabla u_{\varepsilon'} \rightharpoonup \xi_0 \text{ faiblement dans } (L^2(\Omega))^N \end{cases} \quad (6.4)$$

avec de plus :

$$-\operatorname{div} \xi_0 = f \text{ dans } \Omega.$$

La question que l'on se pose alors est de savoir si l'on peut trouver une relation générale entre u_0 et ξ_0 , ainsi qu'une équation limite sur u_0 . Pour le cas périodique, on sait que c'est en fait toute la suite u_ε qui converge vers la solution u_0 , unique solution du problème de conductivité :

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(A_0 \nabla u_0) = f \text{ dans } \Omega \\ u_0 = 0 \text{ sur } \partial\Omega \end{cases} \quad (6.5)$$

où A_0 est la matrice homogénéisée pour laquelle on dispose d'une méthode de construction explicite (voir en particulier Eq. (1.16) au chapitre 1). La matrice A_0 est donc dans ce cas uniquement déterminée.

En revanche, dans le cas non-périodique, la situation est plus délicate. Les limites faibles u_0 et ξ_0 dépendent a priori de la sous-suite extraite considérée, et ne sont plus uniquement déterminées. Ainsi, le fait que la matrice de conductivité A_ε soit dans $M(\alpha, \beta, \Omega)$ implique toujours l'existence d'une matrice A_0 telle que $\xi_0 = A_0 \nabla u_0$, mais A_0 est dépendante de l'extraction choisie (comme u_0 et ξ_0) et n'est pas uniquement déterminée.

Ceci amène alors à définir des notions de convergence particulières nécessaires pour l'étude du cas aléatoire. Le problème de relier ξ_0 à u_0 dans le cas général a largement été étudié dès la fin des années 1960. Le premier travail sur le sujet est dû à S. Spagnolo [42], qui introduit la notion de G -convergence associée au problème elliptique de conductivité (6.2) dans le cas où la matrice de conductivité A_ε est symétrique.

6.2.1 G -convergence

On dit qu'une suite de matrices A_ε symétriques et appartenant à $M(\alpha, \beta, \Omega)$ G -converge vers une matrice symétrique A_0 appartenant à $M(\alpha, \beta, \Omega)$ si pour toute donnée f appartenant à $H^{-1}(\Omega)$, la solution u_ε du problème :

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(A_\varepsilon \nabla u_\varepsilon) = f \text{ dans } \Omega \\ u_\varepsilon = 0 \text{ sur } \partial\Omega \end{cases}$$

est telle que

$$u_\varepsilon \rightharpoonup u_0 \text{ faiblement dans } H_0^1(\Omega)$$

où u_0 est l'unique solution du problème

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(A_0 \nabla u_0) = f \text{ dans } \Omega \\ u_0 = 0 \text{ sur } \partial\Omega \end{cases}$$

On a alors le résultat suivant, dit de compacité, associé à la G -convergence (voir [42]) :

Theorem 6.2.1 *Soit A_ε une suite de matrices symétriques appartenant à $M(\alpha, \beta, \Omega)$. Alors il existe une sous-suite $A_{\varepsilon'}$ et une matrice A_0 appartenant à $M(\alpha, \beta, \Omega)$ telles que la sous-suite $A_{\varepsilon'}$ G -converge vers A_0 .*

La G -convergence a ensuite été étendue au cas des matrices appartenant à $M(\alpha, \beta, \Omega)$ mais plus nécessairement symétriques. Cela a conduit à définir la notion de H -convergence développée par F. Murat et L. Tartar dans [34] et [35].

6.2.2 H -convergence

On dit qu'une suite de matrice A_ε appartenant à $M(\alpha, \beta, \Omega)$ H -converge vers une matrice A_0 appartenant à $M(\alpha, \beta, \Omega)$ si pour toute donnée f appartenant à $H^{-1}(\Omega)$, la solution u_ε du problème :

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(A_\varepsilon \nabla u_\varepsilon) = f & \text{dans } \Omega \\ u_\varepsilon = 0 & \text{sur } \partial\Omega \end{cases}$$

est telle que

$$\begin{cases} i) & u_\varepsilon \rightharpoonup u_0 \text{ faiblement dans } H_0^1(\Omega) \\ ii) & A_\varepsilon \nabla u_\varepsilon \rightharpoonup \xi_0 \text{ faiblement dans } (L^2(\Omega))^N \end{cases}$$

où u_0 est l'unique solution du problème

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(A_0 \nabla u_0) = f & \text{dans } \Omega \\ u_0 = 0 & \text{sur } \partial\Omega \end{cases}$$

Ainsi, la notion de H -convergence est plus générale car elle s'applique à des suites de matrices qui ne sont plus nécessairement symétriques. En outre, elle suppose non seulement la convergence faible de la solution u_ε mais aussi celle de la suite de vecteurs $A_\varepsilon \nabla u_\varepsilon$. Cette hypothèse supplémentaire par rapport à la G -convergence est en fait essentielle pour préserver le résultat de compacité.

La notion de H -convergence est ainsi caractérisée par le résultat de compacité suivant :

Theorem 6.2.2 *Soit A_ε une suite de matrices appartenant à $M(\alpha, \beta, \Omega)$. Alors il existe une sous-suite $A_{\varepsilon'}$ et une matrice A_0 appartenant à $M(\alpha, \beta, \Omega)$ telles que la sous-suite $A_{\varepsilon'}$ H -converge vers A_0 .*

Ce résultat de compacité est à la base de l'élaboration de bornes optimales sur la conductivité effective de milieux hétérogènes isotropes linéaires.

6.2.3 Bornes optimales

Le théorème de compacité associé à la H -convergence affirme que toute suite de matrices A_ε appartenant à $M(\alpha, \beta, \Omega)$ admet une sous-suite qui H -converge vers une certaine matrice A_0 appartenant à $M(\alpha, \beta, \Omega)$. Considérons alors le cas de la conductivité linéaire isotrope :

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(\gamma_\varepsilon \nabla u_\varepsilon) = f & \text{dans } \Omega \\ u_\varepsilon = 0 & \text{sur } \partial\Omega \end{cases} \quad (6.6)$$

où $\alpha \leq \gamma_\varepsilon \leq \beta$, ce qui correspond à un cas particulier du problème de conductivité général (6.2) avec une matrice de conductivité isotrope : $A_\varepsilon = \gamma_\varepsilon I$.

Dans ce cas particulier, la matrice A_ε est symétrique, de sorte que A_0 est aussi la G -limite de A_ε . A_0 est par conséquent aussi symétrique et admet donc N valeurs propres $\lambda_1(x), \lambda_2(x), \dots, \lambda_N(x)$ strictement positives sur le domaine Ω .

Dans une configuration périodique, la conductivité suit une loi de mélange périodique de période ε :

$$\gamma_\varepsilon = \gamma_1 \chi_1\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) + \gamma_2 \chi_2\left(\frac{x}{\varepsilon}\right).$$

Dans ce cas, on sait construire la matrice homogénéisée A_0 .

En revanche, dans le cas non-périodique, on ne sait pas définir explicitement A_0 , qui n'est en général pas nécessairement isotrope même si la suite A_ε l'est.

On cherche alors à caractériser A_0 dans une configuration non-périodique. Considérons un mélange stochastique isotrope de deux phases, pour lequel la matrice de conductivité A_ε est de la forme $\gamma_\varepsilon I$, avec :

$$\gamma_\varepsilon(x) = \begin{cases} \gamma_1 & \text{si } x \in \Omega_1^\varepsilon \\ \gamma_2 & \text{si } x \in \Omega_2^\varepsilon \end{cases}$$

c'est à dire que :

$$\gamma_\varepsilon(x) = \gamma_1 \chi_{\Omega_1^\varepsilon}(x) + \gamma_2 \chi_{\Omega_2^\varepsilon}(x)$$

avec

$$\Omega_1^\varepsilon \cup \Omega_2^\varepsilon = \Omega \text{ et } \Omega_1^\varepsilon \cap \Omega_2^\varepsilon = \emptyset$$

où $\chi_{\Omega_i^\varepsilon}$, définie pour $i = 1, 2$ sont les fonctions caractéristiques associées aux ensembles Ω_i^ε . On suppose que la fraction volumique des deux phases constitutives est fixée :

$$\frac{\|\Omega_1^\varepsilon\|}{\|\Omega\|} = \theta, \quad \frac{\|\Omega_2^\varepsilon\|}{\|\Omega\|} = 1 - \theta, \quad 0 < \theta < 1.$$

Dans ce cas, on peut montrer (voir [28] pour la démonstration) que les valeurs propres de la matrice A_0 vérifient les inégalités suivantes :

$$\begin{cases} \gamma_g \leq \lambda_i \leq \gamma_a, i = 1 \dots N, \\ \sum_{i=1}^N \frac{1}{\lambda_i - \gamma_1} \leq \frac{1}{\gamma_g - \gamma_1} + \frac{N-1}{\gamma_a - \gamma_1} \\ \sum_{i=1}^N \frac{1}{\gamma_2 - \lambda_i} \leq \frac{1}{\gamma_2 - \gamma_g} + \frac{N-1}{\gamma_2 - \gamma_a} \end{cases} \quad (6.7)$$

où γ_a et γ_g correspondent aux moyennes arithmétiques et géométriques respectivement :

$$\begin{cases} \gamma_a = \theta \gamma_1 + (1 - \theta) \gamma_2 \\ \gamma_g = \left(\frac{\theta}{\gamma_1} + \frac{1 - \theta}{\gamma_2} \right)^{-1} \end{cases} \quad (6.8)$$

Dans le cas $N = 2$ et isotrope, pour lequel, $A_0 = \lambda I$, on a $\lambda_- \leq \lambda \leq \lambda_+$ où λ_\pm correspondent aux bornes de Hashin-Shtrikman [22], bien connues en physique :

$$\lambda_- = \frac{\theta \gamma_1 + (1 - \theta) \gamma_2 + \gamma_2}{(1 - \theta) \gamma_1 + \theta \gamma_2 + \gamma_1} \gamma_1, \quad \lambda_+ = \frac{\theta \gamma_1 + (1 - \theta) \gamma_2 + \gamma_1}{(1 - \theta) \gamma_1 + \theta \gamma_2 + \gamma_2} \gamma_2. \quad (6.9)$$

Dans le cas 2D, on peut donner une interprétation géométrique des bornes de Hashin-Shtrikman, calculées suivant (6.9) et illustrées sur la Fig. 6.5. Le point C_1 est défini par les coordonnées (γ_g, γ_a) et parcourt, lorsque l'on fait varier la concentration relative des phases, la branche d'hyperbole h_1 définie par l'équation :

$$(h_1) : y_1 = \frac{\gamma_1 \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2 - y_2}.$$

De même, le point C_2 , défini par les coordonnées (γ_a, γ_g) dessine l'hyperbole h_2 , image de h_1 par rapport à la symétrie d'axe $y_2 = y_1$. Les points B_1 et B_2 sont donnés par (γ_a, γ_a) et (γ_g, γ_g) respectivement.

La première ligne du système d'inégalités (6.7) (correspondant aux bornes dites de Voigt et Reuss) signifie que les valeurs propres de A_0 sont contenues dans le carré $B_1 C_2 B_2 C_1$. Les deux inégalités suivantes correspondent aux bornes d'Hashin Shtrikman et traduisent le fait que les valeurs propres de A_0 sont contenues dans la zone centrale située entre les deux portions d'hyperbole h_3 et h_4 , d'équations :

$$\begin{aligned} (h_3) : \frac{1}{y_1 - \gamma_1} + \frac{1}{y_2 - \gamma_1} &= \frac{1}{\gamma_g - \gamma_1} + \frac{1}{\gamma_a - \gamma_1}, \\ (h_4) : \frac{1}{\gamma_2 - y_1} + \frac{1}{\gamma_2 - y_2} &= \frac{1}{\gamma_2 - \gamma_g} + \frac{1}{\gamma_2 - \gamma_a}. \end{aligned}$$

6.3 Régimes non-linéaires

On considère maintenant le problème de conductivité posé dans un milieu hétérogène isotrope 2D caractérisé par une loi de comportement *non-linéaire*.

Nous commençons par définir un nouveau jeu de notations que l'on emploiera dans la suite. Le problème elliptique de la conductivité peut s'exprimer de manière générale sous la forme :

$$\operatorname{div} \mathbf{q} = 0 \text{ dans } \Omega, \quad \mathbf{q} = \frac{\partial W}{\partial \mathbf{g}}(\mathbf{g}, \mathbf{x}), \quad \mathbf{g} \in \mathcal{K}(\bar{\mathbf{g}}), \quad (6.10)$$

où \mathbf{g} est le gradient de température, \mathbf{q} étant défini comme l'opposé du flux de chaleur, $W(\mathbf{g}, \mathbf{x})$ est l'énergie mécanique du milieu hétérogène, $\mathcal{K}(\bar{\mathbf{g}})$ est l'ensemble des champs de gradients de températures admissibles pour une condition limite $\bar{\mathbf{g}}$ imposée sur le bord du domaine $\partial\Omega$:

$$\mathcal{K}(\bar{\mathbf{g}}) = \{\mathbf{g} : \Omega \mapsto \mathbb{R}^2 \mid \exists \theta : \Omega \mapsto \mathbb{R} \text{ tels que } \mathbf{g} = \nabla \theta \text{ dans } \Omega \text{ et } \theta(\mathbf{x}) = \bar{\mathbf{g}} \cdot \mathbf{x} \text{ sur } \partial\Omega\},$$

$\theta(\mathbf{x})$ étant la température régnant à l'intérieur du domaine Ω .

La relation :

$$\mathbf{q} = \frac{\partial W}{\partial \mathbf{g}}(\mathbf{g}, \mathbf{x}), \quad (6.11)$$

représente la loi de comportement locale au point \mathbf{x} .

Par souci de simplicité, nous nous plaçons dans un cadre isotrope, mais l'approche développée ici peut être étendue dans des configurations de milieux hétérogènes plus générales, dites "isotropes transverses", c'est à dire caractérisées par une direction d'invariance particulière.

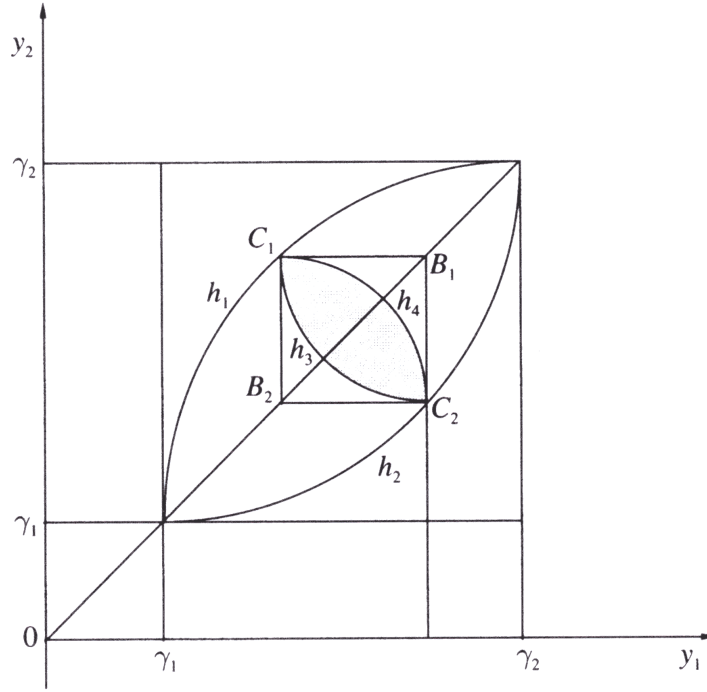


FIGURE 6.5 – Représentation des bornes de Hashin-Shtrikman.

Les valeurs propres de la matrice A_0 sont contenues dans la zone centrale comprise entre les hyperboles (h_3) et (h_4), correspondant aux bornes d'Hashin Shtrikman. Ces bornes sont meilleures que les bornes de Voigt et Reuss, correspondant à la moyenne géométrique et arithmétique des conductivités, représentées par le carré $B_1C_2B_2C_1$.

6.3.1 Approche par immersion sur l'énergie effective

Dans ce travail, on cherche à borner l'énergie effective du milieu composite. Ceci est a priori plus simple à traiter que la loi de comportement qui en dérive. Pour un composite constitué de n phases, l'énergie est définie par :

$$W(\mathbf{g}, \mathbf{x}) = \sum_1^n \chi_r(x) W_r(\mathbf{g}),$$

où χ_r est la fonction caractéristique de la phase $r \in \{1, 2, \dots, n\}$ valant 1 si x est dans la phase r et 0 sinon. On a :

$$\sum_r \chi_r = 1.$$

La connaissance des fonctions caractéristiques détermine complètement la micro-structure. Pour une loi de comportement non-linéaire correspondant à une fonction puissance, l'énergie de la phase r $W_r(\mathbf{g})$ est donnée par :

$$W_r(\mathbf{g}) = K_r \|\mathbf{g}\|^{n_r}. \quad (6.12)$$

Remarque 6.3.1 Dans l'expression de l'énergie (6.12), l'exposant de non-linéarité n_r peut être réel.

On cherche alors à borner l'énergie effective du milieu définie par :

$$\mathcal{W}^{eff}(\mathbf{g}) = \inf_{\mathbf{g} \in \mathcal{K}(\bar{\mathbf{g}})} \int_{\Omega} W(\mathbf{g}, \mathbf{x})$$

Pour calculer des bornes sur \mathcal{W}^{eff} , on part de la méthode dite de *translation* [31], issue de la théorie de l'homogénéisation [33], et développée ensuite plus spécifiquement dans le cadre de la modélisation des matériaux composites [46], [39]. C'est sur la base de cette méthode que des bornes ont déjà été établies dans des régimes non-linéaires. Une technique possible pour raffiner les bornes existante est alors d'employer une méthode dite d'*immersion* (voir en particulier [31] chapitre 24), consistant à copier artificiellement l'espace physique afin d'accroître la dimension de l'espace de travail dans lequel on effectue la recherche de bornes. Le couplage entre la méthode de translation en régime non-linéaire et la technique d'immersion n'a encore jamais été fait et peut permettre d'améliorer les bornes existantes.

Plus précisément, on définit l'énergie généralisée associée à la phase r par :

$$W_r(\mathbf{G}) = \sum_{i=1}^3 W_r(\mathbf{g}_i),$$

de même que l'énergie effective généralisée :

$$\mathcal{W}^{eff}(\bar{\mathbf{G}}) = \sum_{i=1}^3 \mathcal{W}^{eff}(\bar{\mathbf{g}}_i), \quad (6.13)$$

où $\mathbf{G} = (\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \mathbf{g}_3)$ est le gradient de température généralisé et $\bar{\mathbf{G}} = (\bar{\mathbf{g}}_1, \bar{\mathbf{g}}_2, \bar{\mathbf{g}}_3)$ représente la condition limite, tous deux écrits dans l'espace dupliqué, chaque composante \mathbf{g}_i et $\bar{\mathbf{g}}_i$ évoluant dans \mathbb{R}^2 . Pour chaque copie $\bar{\mathbf{g}}_i$ de la condition limite $\bar{\mathbf{g}}$, $i \in \{1, 2, 3\}$, on introduit l'espace des champs admissibles :

$$\mathcal{K}(\bar{\mathbf{g}}_i) = \{\mathbf{g}_i : \Omega \mapsto \mathbb{R}^2 | \exists \theta : \Omega \mapsto \mathbb{R} \text{ tels que } \mathbf{g}_i = \nabla \theta \text{ dans } \Omega \text{ et } \theta(\mathbf{x}) = \bar{\mathbf{g}}_i \cdot \mathbf{x} \text{ sur } \partial\Omega\}.$$

Ceci nous permet de définir l'ensemble des champs admissibles évoluant dans l'espace dupliqué :

$$\mathcal{K}(\bar{\mathbf{G}}) = \{\mathbf{G} = (\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \mathbf{g}_3) | \mathbf{g}_1 \in \mathcal{K}(\bar{\mathbf{g}}_1), \mathbf{g}_2 \in \mathcal{K}(\bar{\mathbf{g}}_2), \mathbf{g}_3 \in \mathcal{K}(\bar{\mathbf{g}}_3)\}.$$

Remarque 6.3.2 La technique d'immersion consiste ainsi à définir trois "copies" de l'espace physique dans lequel le problème est posé, ici \mathbb{R}^2 . Le milieu hétérogène considéré est caractérisé par une isotropie dans l'espace \mathbb{R}^2 , de sorte que chaque copie introduite est en fait reliée à une direction d'invariance du comportement non-linéaire du milieu hétérogène.

Nous appliquons alors la méthode de translation (voir par exemple [33], [46], [31]) sur l'énergie $\mathcal{W}^{eff}(\mathbf{G})$ définie dans l'espace dupliqué.

6.3.2 Application de la méthode de translation sur l'énergie

Dans la méthode de translation, il est d'abord nécessaire d'introduire une fonction quasi-convexe $\mathcal{U}(\mathbf{G})$, que l'on appelle le potentiel de comparaison. Une fonction $\mathcal{U}(\mathbf{G})$ est quasi-convexe si et seulement si :

$$\int_{\Omega} \mathcal{U}(\mathbf{G}) d\mathbf{x} \geq \mathcal{U}(\bar{\mathbf{G}}), \text{ pour tout } \mathbf{G} \in \mathcal{K}(\bar{\mathbf{G}}). \quad (6.14)$$

Dans le cas où il y a égalité, on parle de potentiel "null-Lagrangian".

Ensuite, la méthode des translations requiert le calcul des transformées de Legendre pour chacune des phases r du milieu hétérogène :

$$(W_r - \mathcal{U})^*(\mathbf{T}) = \sup_{\mathbf{G}} \mathbf{G} \cdot \mathbf{T} - W_r(\mathbf{G}) + \mathcal{U}(\mathbf{G}), \quad (6.15)$$

où \mathbf{T} est un vecteur fixé (dit polarisation) de l'espace dupliqué \mathbb{R}^6 .

Remarque 6.3.3 Dans l'Eq. (6.15), le sup est bien pris sur l'ensemble \mathbb{R}^6 et pas dans $\mathcal{K}(\bar{\mathbf{G}})$, qui est un espace de fonctions, beaucoup plus grand que \mathbb{R}^6 . Le fait que le champ $x \rightarrow G(x)$ soit admissible n'apparaît pas dans la définition de la transformée de Legendre.

L'équation (6.15) implique, pour tout $\mathbf{G} \in \mathcal{K}(\bar{\mathbf{G}})$:

$$W_r(\mathbf{G}) \geq \mathbf{G} \cdot \mathbf{T} + \mathcal{U}(\mathbf{G}) - (W_r - \mathcal{U})^*(\mathbf{T}). \quad (6.16)$$

On multiplie ensuite chaque membre de l'inégalité (6.16) par la fonction caractéristique $\chi_r(\mathbf{x}) \geq 0$ et on somme sur toutes les phases du milieu composite :

$$\sum_r \chi_r(\mathbf{x}) W_r(\mathbf{G}) \geq \underbrace{\sum_r \chi_r}_{=1} \mathbf{G} \cdot \mathbf{T} + \underbrace{\sum_r \chi_r}_{=1} \mathcal{U}(\mathbf{G}) - \sum_r \chi_r(\mathbf{x}) (W_r - \mathcal{U})^*(\mathbf{T}).$$

Intégrant alors sur tout le domaine Ω , on trouve :

$$\int \sum_r \chi_r W_r(\mathbf{G}) d\mathbf{x} \geq \int \mathbf{G} \cdot \mathbf{T} d\mathbf{x} + \int \mathcal{U}(\mathbf{G}) d\mathbf{x} - \int \sum_r \chi_r (W_r - \mathcal{U})^*(\mathbf{T}) d\mathbf{x}.$$

On utilise que pour tout $\mathbf{G} \in \mathcal{K}(\bar{\mathbf{G}})$:

$$\int \mathbf{G} d\mathbf{x} = \bar{\mathbf{G}},$$

ainsi que l'hypothèse de quasi-convexité sur $\mathcal{U}(\mathbf{G})$ pour en déduire :

$$\int \sum_r \chi_r W_r(\mathbf{G}) d\mathbf{x} \geq \bar{\mathbf{G}} \cdot \mathbf{T} + \mathcal{U}(\bar{\mathbf{G}}) - \sum_r c_r (W_r - \mathcal{U})^*(\mathbf{T}), \quad (6.17)$$

où $c_r = \int \chi_r(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$ est la fraction volumique de la phase r .

Remarquons que la variable \mathbf{T} ne dépend pas de \mathbf{x} .

Comme (6.17) est vraie pour tout $\mathbf{G} \in \mathcal{K}(\bar{\mathbf{G}})$, on peut écrire :

$$\inf_{\mathbf{G} \in \mathcal{K}(\bar{\mathbf{G}})} \int \sum_r \chi_r W_r(\mathbf{G}) d\mathbf{x} \geq \bar{\mathbf{G}} \cdot \mathbf{T} + \mathcal{U}(\bar{\mathbf{G}}) - \sum_r c_r (W_r - \mathcal{U})^*(\mathbf{T}), \quad (6.18)$$

et ce, pour tout \mathbf{T} .

Les vecteurs $(\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \mathbf{g}_3)$ étant indépendants, on obtient finalement :

$$\inf_{\mathbf{G} \in \mathcal{K}(\bar{\mathbf{G}})} \int \sum_r \chi_r W_r(\mathbf{G}) d\mathbf{x} = \sum_{i=1}^3 \inf_{\mathbf{g}_i \in \mathcal{K}(\bar{\mathbf{g}}_i)} \int \sum_r \chi_r W_r(\mathbf{g}_i) d\mathbf{x}.$$

Ainsi, de par la définition de l'énergie effective $\mathcal{W}^{eff}(\bar{\mathbf{G}})$ donnée par (6.13), on arrive à :

$$\inf_{\mathbf{G} \in \mathcal{K}(\bar{\mathbf{G}})} \int \sum_r \chi_r W_r(\mathbf{G}) d\mathbf{x} = \sum_{i=1}^3 \mathcal{W}^{eff}(\bar{\mathbf{g}}_i) = \mathcal{W}^{eff}(\bar{\mathbf{G}}).$$

De l'inégalité (6.18), on déduit une borne inférieure pour l'énergie effective du composite :

$$\mathcal{W}^{eff}(\bar{\mathbf{G}}) \geq \bar{\mathbf{G}} \cdot \mathbf{T} + \mathcal{U}(\bar{\mathbf{G}}) - \sum_r c_r (W_r - \mathcal{U})^*(\mathbf{T}), \quad (6.19)$$

paramétrée par $\mathbf{T} \in \mathbb{R}^6$.

6.3.3 Choix du potentiel de comparaison quasi-convexe

La borne inférieure donnée (6.19) s'applique pour tout potentiel de comparaison $\mathcal{U}(\bar{\mathbf{G}})$ vérifiant l'hypothèse de quasi-convexité. La difficulté est qu'il n'existe pas de caractérisation simple de la quasi-convexité. Le problème se simplifie avantageusement dans le cas des fonctions quadratiques, pour lesquelles la quasi-convexité est équivalente à la convexité de rang-1 (voir [12]). Une fonction f est dite convexe de rang-1 (rank-one convex) si :

$$f(\lambda\xi + (1-\lambda)\eta) \leq \lambda f(\xi) + (1-\lambda)f(\eta),$$

pour tout $\lambda \in [0, 1]$, $\eta, \xi \in \mathbb{R}^4$, avec $\det(\xi - \eta) = 0$. Notons que si $\xi = (\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4) \in \mathbb{R}^4$, alors l'action du déterminant s'écrit simplement suivant : $\det\xi = \xi_1\xi_4 - \xi_2\xi_3$.

Si l'on était resté dans l'espace physique \mathbb{R}^2 , l'application de la méthode de translation ne pourrait déboucher sur une amélioration des bornes déjà publiées dans la littérature [39]. En effet, on peut montrer que toute fonction quadratique quasi-convexe est nécessairement convexe, et on ne peut aboutir à une amélioration en appliquant la méthode des translations avec un potentiel convexe ([31]). Pour espérer trouver de meilleures bornes, il s'avère nécessaire de considérer un potentiel de comparaison qui soit quasi-convexe sans être strictement convexe. De tels potentiels se rencontrent par exemple dans les problèmes d'élasticité, caractérisés par une dimension plus élevée. Il est alors possible de

construire des fonctions quadratiques quasi-convexes (ou, de manière équivalente, convexe de rang-1), qui ne soient pour autant convexes. On se situe ainsi dans une situation où la faible dimension du problème de conductivité considéré (évoluant dans \mathbb{R}^2), apparaît - du point de vue de l'application de la méthode de translation - plus comme un inconvénient qu'un avantage. Ceci donne sens à la technique d'immersion employée (ou "embedding"), consistant à *immerger* le problème initial (6.10) posé dans \mathbb{R}^2 , dans un espace de travail caractérisé par une dimension plus importante. Cette immersion s'effectue en dupliquant - éventuellement plusieurs fois - l'espace physique de départ. Le calcul de bornes prend alors la forme d'un problème d'optimisation à résoudre dans l'espace dupliqué, dont la dimension est plus importante. On est alors susceptible d'aboutir à de nouvelles estimations pour les propriétés effectives du milieu hétérogène.

On définit dans le cas traité ici deux copies de l'espace physique, ce qui conduit à la définition de l'énergie généralisée (6.13). L'espace de travail retenu pour appliquer la méthode de translation est ainsi \mathbb{R}^6 , dont la dimension est a priori suffisante pour pouvoir espérer construire un potentiel de comparaison quadratique quasi-convexe mais non convexe.

Un choix possible pour le potentiel de comparaison \mathcal{U} est :

$$\mathcal{U}(\mathbf{G}) = \frac{1}{2}\alpha \mathbf{G}' \mathbf{M} \mathbf{G}, \quad (6.20)$$

pour tout α dans \mathbb{R} et avec :

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

On peut vérifier que la fonction quadratique \mathcal{U} est quasi-convexe (et même "null-lagrangian") sans être convexe. La forme du potentiel (6.20) est basée sur l'expression générale d'une forme quadratique. On s'appuie ensuite sur l'action du déterminant que l'on sait être null-Lagrangian pour le choix de la matrice \mathbf{M} . On arrive ainsi à un potentiel quadratique null-Lagrangian, relativement simple à manipuler. Ce choix est donc pertinent pour la recherche de nouvelles bornes sur l'énergie effective du milieu composite, en lien avec l'application de la méthode de translation. Les trois valeurs propres de \mathbf{M} sont ± 3 , et 0. Pour la suite, on définit en particulier le vecteur propre de \mathbf{M}

$$\bar{\mathbf{e}}_1 = (1, -\sqrt{3}, -1, -\sqrt{3}, -2, 0),$$

associé à la valeur propre -3 .

6.3.4 Stratégie pour la recherche de nouvelles bornes

Dans l'application de la méthode de translation, le cœur du problème est de calculer la transformée de Legendre (6.15) de manière précise pour chaque phase r du milieu

hétérogène. Dans cette section, on fixe une phase donnée r pour laquelle on expose la méthode numérique développée pour calculer la transformée de Legendre (6.15). Pour clarifier l'exposé, on considère le cas $\alpha = 1$ et \mathbf{T} est pris tel que :

$$\mathbf{T} = \tau \overline{e_1} \quad (6.21)$$

avec $\tau \neq 0$. Il s'agit ainsi de résoudre le problème de maximisation suivant :

$$\sup_{\mathbf{G} \in \mathbb{R}^6} \mathcal{F}(\mathbf{G}) \quad (6.22)$$

où

$$\mathcal{F}(\mathbf{G}) = \mathbf{G} \cdot \mathbf{T} - W_r(\mathbf{G}) + \mathcal{U}(\mathbf{G}), \quad (6.23)$$

Le problème (6.22)-(6.23) est un problème d'optimisation non-linéaire posé dans \mathbb{R}^6 . Sauf dans des cas très particuliers, ce problème ne peut se résoudre analytiquement. Il est alors nécessaire d'avoir recours à des techniques numériques pour la recherche de l'optimum global. Les algorithmes de gradients fournissent un optimum local, qui ne correspond pas forcément à l'optimum global du problème. La situation est particulièrement critique ici puisque le potentiel de comparaison \mathcal{U} intervenant dans la fonctionnelle à maximiser \mathcal{F} (6.23) est volontairement choisi non-convexe⁹ et peut donc présenter de multiples points stationnaires, pouvant piéger l'algorithme de maximisation dans un optimum local. On peut alors penser à une méthode numérique de maximisation globale consistant à balayer tout l'espace avec un pas suffisamment fin. Ce genre d'approche s'avère beaucoup plus coûteuse que les méthodes de gradients. De plus, le problème (6.22)-(6.23) doit être résolu à répétition. Une méthode globale appliquée sur tout l'espace de travail (\mathbb{R}^6) risque d'engendrer des temps calculs prohibitifs.

Néanmoins, on peut montrer par des manipulations algébriques des conditions de stationnarité qu'il est en fait possible de réduire le problème d'optimisation non-linéaire dans \mathbb{R}^2 , ce qui rend l'approche utilisable en pratique. Le problème nécessite toujours d'être résolu numériquement, mais l'optimisation globale dans \mathbb{R}^2 devient plus simple à effectuer.

On expose dans la suite comment le problème d'optimisation initialement posé dans \mathbb{R}^6 peut être réduit à un problème de recherche d'optimum plus simple, revenant à balayer numériquement un disque dans \mathbb{R}^2 de rayon fini. Pour cela, on montre que tout point stationnaire \mathcal{F} est en fait déterminé par les deux composantes scalaires g_{3x} and g_{3y} .

A cette fin, on remarque tout d'abord que la condition de stationnarité

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathbf{G}} = 0$$

peut s'écrire :

$$\mathbf{T} = (\beta_1 \mathbf{g}_1, \beta_2 \mathbf{g}_2, \beta_3 \mathbf{g}_3) - \alpha \mathbf{M} \mathbf{G}, \quad (6.24)$$

avec

$$\beta_i = w'(\|\mathbf{g}_i\|).$$

9. ceci, rappelons le, afin d'être susceptible de faire apparaître de nouvelles bornes

(w s'interprète comme une fonction de $\|\mathbf{g}_i\|$). L'idée est alors de traiter les variables β_i et \mathbf{g}_i comme des variables indépendantes. Plus précisément, en projetant (6.25) sur la base canonique de \mathbb{R}^6 , on obtient les six équations suivantes :

$$\beta_1 g_{1x} - g_{2y} - g_{3y} = \tau \quad (6.25)$$

$$\beta_1 g_{1y} + g_{2x} + g_{3x} = -\sqrt{3}\tau \quad (6.26)$$

$$\beta_2 g_{2x} + g_{1y} - g_{3y} = -\tau \quad (6.27)$$

$$\beta_2 g_{2y} - g_{1x} + g_{3x} = -\sqrt{3}\tau \quad (6.28)$$

$$\beta_3 g_{3x} + g_{1y} + g_{2y} = -2\tau \quad (6.29)$$

$$\beta_3 g_{3y} - g_{1x} - g_{2x} = 0 \quad (6.30)$$

Les deux équations (6.26-6.27) peuvent se récrire suivant un système linéaire en (g_{1y}, g_{2x}) , à savoir

$$\begin{pmatrix} \beta_1 & 1 \\ 1 & \beta_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g_{1y} \\ g_{2x} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{3}\tau - g_{3x} \\ -\tau + g_{3y} \end{pmatrix} \quad (6.31)$$

Pourvu que le déterminant $\beta_1\beta_2 - 1 \neq 0$, le système linéaire (6.31) peut être inversé pour exprimer g_{1y} et g_{2x} en fonction τ , \mathbf{g}_3 , β_1 and β_2 . Les expressions correspondantes sont

$$\begin{aligned} g_{1y} &= \frac{1}{Y}(-\beta_2 p + \tau - g_{3y}) \\ g_{2x} &= \frac{1}{Y}(p - \beta_1(\tau - g_{3y})) \end{aligned} \quad (6.32)$$

où

$$Y = \beta_1\beta_2 - 1, \quad p = g_{3x} - \sqrt{3}\tau \quad (6.33)$$

De même, les équations (6.25-6.28) donnent :

$$\begin{aligned} g_{1x} &= \frac{1}{Y}(\beta_2(\tau + g_{3y}) - p) \\ g_{2y} &= \frac{1}{Y}(\tau + g_{3y} - \beta_1 p) \end{aligned} \quad (6.34)$$

Les expressions (6.32) et (6.34) peuvent être utilisées afin d'exprimer $g_{1x} + g_{2x}$ et $g_{1y} + g_{2y}$ en fonction de τ , \mathbf{g}_3 , β_1 et β_2 . En injectant le résultat dans (6.29-6.30), on obtient deux équations pouvant s'écrire sous la forme matricielle suivante :

$$\begin{pmatrix} p & p \\ -\tau + g_{3y} & \tau + g_{3y} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Y(\beta_3 g_{3x} + 2\tau) + 2\tau \\ \beta_3 g_{3y} Y \end{pmatrix} \quad (6.35)$$

En inversant (6.35) par rapport à (β_1, β_2) , et pourvu que $p \neq 0$, on arrive à :

$$\begin{aligned} \beta_1 &= \frac{(\tau + g_{3y})(Y(\beta_3 g_{3x} + 2\tau) + 2\tau) - \beta_3 g_{3y} p Y}{2\tau p} \\ \beta_2 &= \frac{(\tau - g_{3y})(Y(\beta_3 g_{3x} + 2\tau) + 2\tau) + \beta_3 g_{3y} p Y}{2\tau p} \end{aligned} \quad (6.36)$$

En multipliant ces deux expressions, on obtient une équation dans laquelle les inconnues β_1 et β_2 n'apparaissent que sous la forme du produit $\beta_1\beta_2$. Plus précisément, cette équation est du second degré en Y et s'écrit :

$$a(\mathbf{g}_3)Y^2 + 2b(\mathbf{g}_3)Y + c(\mathbf{g}_3) = 0 \quad (6.37)$$

avec

$$\begin{aligned} a(\mathbf{g}_3) &= (\beta_3 g_{3x} + 2\tau)^2 - g_{3y}^2 (2 + \sqrt{3}\beta_3)^2 \\ b(\mathbf{g}_3) &= -2(p^2 - \beta_3 p\tau - (2 + \sqrt{3}\beta_3)(\tau^2 - g_{3y}^2)) \\ c(\mathbf{g}_3) &= -4(p^2 - \tau^2 + g_{3y}^2) \end{aligned} \quad (6.38)$$

Pour simplifier la présentation, on ne considère que la situation la plus fréquente où $a(\mathbf{g}_3) \neq 0$. Quelques manipulations montrent que

$$b^2(\mathbf{g}_3) - a(\mathbf{g}_3)c(\mathbf{g}_3) = 4p^2q$$

où

$$q = p^2 + \beta_3(2\tau g_{3x} + \beta_3 g_{3x}^2 - 2\sqrt{3}g_{3y}^2 - 2\beta_3 g_{3y}^2)$$

Par conséquent, les solutions de l'Eq. (6.37) sont

$$Y_\epsilon = \frac{-b(\mathbf{g}_3) + 2\epsilon|p|\sqrt{q}}{a(\mathbf{g}_3)}$$

avec $\epsilon = \pm 1$. En posant $Y = Y_\epsilon$ dans (6.36) et en injectant le résultat dans (6.32)-(6.34) on arrive à

$$\begin{aligned} g_{1x} &= \frac{1}{2}(\beta_3 g_{3y} + p - \epsilon\sqrt{q}) \\ g_{1y} &= \frac{1}{2}(-\beta_3 g_{3x} - 2\tau + 2g_{3y} + \sqrt{3}\beta_3 g_{3y}) \\ g_{2x} &= \frac{1}{2}(\beta_3 g_{3y} - p + \epsilon\sqrt{q}) \\ g_{2y} &= \frac{1}{2}(-\beta_3 g_{3x} - 2\tau - 2g_{3y} - \sqrt{3}\beta_3 g_{3y}) \end{aligned} \quad (6.39)$$

On peut vérifier que les expressions (6.39) restent valables lorsque $p = 0$ ou $Y = 0$. On observe également que changer $\mathbf{g}_3 = (g_{3x}, g_{3y})$ en $(g_{3x}, -g_{3y})$ a en fait pour effet d'échanger \mathbf{g}_1 avec \mathbf{g}_2 .

Pour tout $\mathbf{g}_3 \in \mathbb{R}^2$ tel que $q \geq 0$, le vecteur $(\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \mathbf{g}_3)$ donné par (6.39) est désigné par $\mathcal{G}_\epsilon(\mathbf{g}_3)$. On considère maintenant la solution $\mathbf{G}^* = (\mathbf{g}_1^*, \mathbf{g}_2^*, \mathbf{g}_3^*)$ de (6.22). L'analyse qui précède montre que

$$\mathbf{G}^* = \mathcal{G}_\epsilon(\mathbf{g}_3^*)$$

pour un certain $\epsilon \in \{-1, 1\}$.

Ainsi, le maximum global de \mathcal{F} peut être déterminé en ne considérant les valeurs prises par la fonction \mathcal{F} que sur l'ensemble

$$\{\mathcal{G}_\epsilon(\mathbf{g}_3) : \mathbf{g}_3 \in \mathbb{R}^2; q \geq 0\}$$

Cet ensemble constitue une variété bi-dimensionnelle (c'est à dire une surface) de \mathbb{R}^6 , paramétrée par $\mathbf{g}_3 \in \mathbb{R}^2$.

En outre, en utilisant le fait que $\mathcal{F} \rightarrow -\infty$ lorsque $\|\mathbf{G}\| \rightarrow \infty$, le problème d'optimisation 2D

$$\sup_{\mathbf{g}_3 \in \mathbb{R}^2: q \geq 0} \mathcal{F}(\mathcal{G}_\epsilon(\mathbf{g}_3))$$

peut en fait se réduire à une optimisation sur un disque de \mathbb{R}^2 de rayon fini.

6.3.5 Mise en œuvre numérique

La stratégie numérique mise en œuvre pour le calcul de la borne inférieure sur l'énergie effective du milieu hétérogène est donc la suivante :

- Pour un couple (\mathbf{T}, α) fixé, on calcule la transformée de Legendre $(W_r - U)^*$ pour chacune des phases r du milieu hétérogène.
- Pour ce faire, on met en place un balayage numérique 2D par rapport aux variables (g_{3x}, g_{3y}) , en se restreignant à un disque de rayon fini.
- A partir de (g_{3x}, g_{3y}) , on calcule les coefficients définis par (6.38), correspondant à l'équation du second degré (6.37) sur Y .
- On résout (6.37), ce qui nous donne deux solutions possibles pour Y .
- A partir de Y , on peut calculer les deux autres composantes $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2$. Cela nous permet d'évaluer la fonction à maximiser $\mathcal{F}(\mathbf{G})$ définie en (6.23).
- On retient alors le maximum obtenu sur le disque parcouru.

Cette méthode garantit bien l'obtention du maximum global et assure donc le calcul précis des transformées de Legendre. La borne est finalement donnée en combinant les différentes transformées de Legendre associées à chacune des phases selon (6.19). Une dernière minimisation numérique par rapport aux variables (\mathbf{T}, α) peut éventuellement être envisagée pour raffiner la borne inférieure sur l'énergie effective.

Remarque 6.3.4 *Une approche duale peut être mise au point pour le calcul d'une borne supérieure sur l'énergie effective. La méthode numérique est sensiblement la même que celle permettant le calcul de la borne inférieure.*

6.3.6 Illustrations numériques pour le calcul de la borne inférieure

On conclut ce chapitre par des illustrations numériques montrant que l'approche proposée améliore les bornes existantes.

On considère pour cela une classe de milieux composites formés de deux phases, chacune caractérisée par une loi de comportement non-linéaire. Plus particulièrement, on suppose que l'énergie de la phase suit une fonction puissance : $W_i(\mathbf{g}) = \gamma_i \|\mathbf{g}\|^{n+2}$ ($n = 0$ correspond au comportement linéaire). L'exposant pilotant la non-linéarité de la loi de comportement est ainsi supposé être le même sur l'ensemble des phases. Dans ce cas, on peut montrer que l'énergie effective du matériau se met sous la forme : $W_{eff} = \gamma_{eff} \|\mathbf{g}\|^{n+2}$. On cherche ainsi à donner une borne inférieure pour γ_{eff} . Deux cas sont alors envisagés :

- Un cas dit "rigide", correspondant à un milieu où l'une des deux phases est caractérisée par une conductivité γ_i infinie. Dans ce cas, on peut montrer que le calcul des bornes se simplifie car la transformée de Legendre associée à la phase rigide est nulle. Il ne reste plus qu'une seule transformée de Legendre à calculer numériquement.
- Un cas où le contraste γ_1/γ_2 entre les conductivités respectives des deux phases reste fini.

Les résultats dans le cas rigide sont représentés sur la Fig. 6.6. Dans la Fig. 6.6-gauche, on trace le rapport γ_1/γ_{inf} où γ_{inf} désigne la borne inférieure sur la conductivité effective, en fonction de la concentration c_1 de la phase 1. Lorsque c_1 tend vers 1, le matériau

composite tend vers un matériau uniquement constitué de la phase 1 et sa conductivité tend naturellement vers γ_1 . Le tracé est effectué pour différents exposants pilotant la loi de comportement non-linéaire du composite. En outre, la borne inférieure sur la conductivité effective est calculée en chaque point de concentration suivant deux approches :

- l’approche proposée par immersion,
- la méthode dite par linéaire de comparaison [39] que l’on considère comme une référence pour les comparaisons. Ces bornes ne sont a priori pas optimales et peuvent éventuellement être améliorées. Cette méthode revient à prendre un potentiel de comparaison linéaire particulier, correspondant à l’énergie d’un matériau composite linéaire fictif, caractérisé par la même micro-structure que le milieu hétérogène non-linéaire considéré. Il n’y a pas non plus de notion d’immersion.

Sur la Fig. 6.6-gauche, les courbes en traits pleins correspondent à la nouvelle borne calculée par l’approche par immersion, tandis que les courbes en traits pointillés correspondent à la borne inférieure calculée suivant la méthode proposée dans [39]. Le cas $n = 0$ correspond au cas linéaire pour lequel les deux approches coïncident. Pour $n \geq 1$, la borne inférieure calculée par immersion est supérieure à la borne [39] et est donc meilleure. L’amélioration est plus marquée lorsque l’indice de non-linéarité augmente.

La Fig. 6.6-droite représente l’amélioration relative de la borne inférieure calculée suivant l’approche par immersion par rapport à la borne de la référence [39], désignée par k_{ppc} . Le tracé est effectué en fonction de la concentration de la phase 1, et pour différents exposants caractérisant la loi de comportement non-linéaire. L’approche par immersion conduit donc à une amélioration nette de la borne inférieure de [39], en particulier lorsque le milieu devient fortement non-linéaire.

Pour le cas du contraste fini, on obtient également une amélioration en calculant la borne inférieure par l’approche par immersion. Plus particulièrement, on représente sur la Fig. 6.7-gauche, le rapport de la borne inférieure γ_{inf} sur la conductivité de la phase 1 γ_1 en fonction du contraste γ_2/γ_1 , pour différentes valeurs de concentration c_1 (correspondant à la phase 1), et pour différents exposants de non-linéarité. Sur la Fig. 6.7-droite, on représente le rapport γ_1/γ_{inf} en fonction de la concentration c_1 de la phase 1, pour différentes valeurs (finies) de contraste γ_2/γ_1 . La borne inférieure calculée suivant l’approche par immersion améliore strictement la borne de la référence [39], et ce d’autant plus que la non-linéarité et la valeur du contraste augmentent.

L’amélioration est aussi plus marquée pour une concentration c_1 proche de 0.5. Ceci est intuitif, puisque lorsque c_1 tend vers 1 (resp. 0), le milieu hétérogène tend vers un milieu uniquement constitué de la phase 1 (resp. 2), de sorte que la conductivité effective tend vers γ_1 (resp. γ_2).

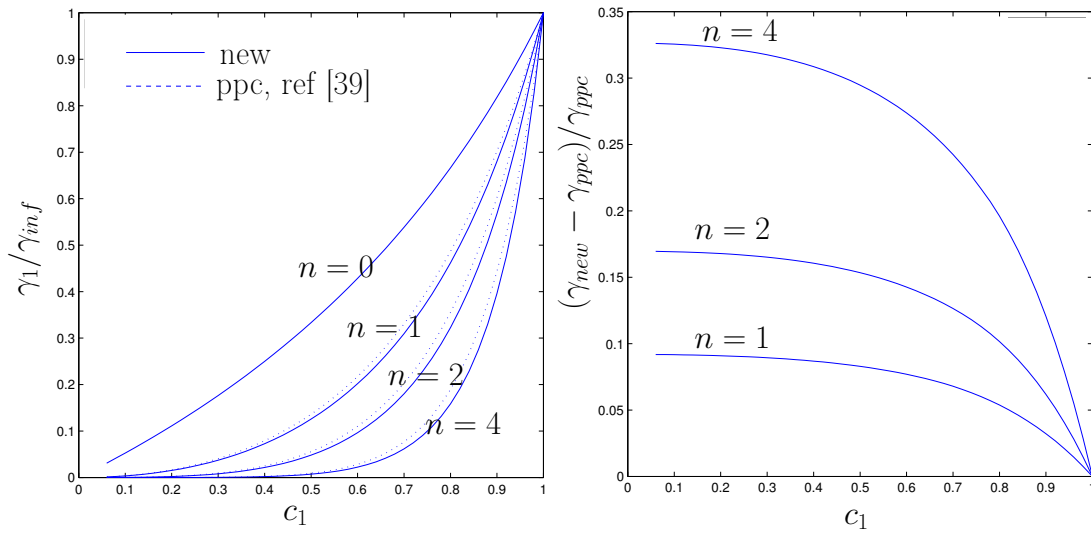


FIGURE 6.6 – Amélioration de la borne inférieure sur la conductivité effective dans le cas rigide.

A gauche, on trace le rapport γ_1/γ_{inf} où γ_{inf} est ici la borne inférieure sur la conductivité effective, en fonction de la concentration c_1 de la phase 1. Les courbes en pointillés désignent les résultats associés à la borne inférieure calculée selon [39].

A droite, on trace l'amélioration relative sur la borne inférieure γ_{inf} apportée par l'approche par immersion par rapport aux valeurs de référence [39] désignées par γ_{ppc} , basées sur une méthode de type linéaire de comparaison. n désigne l'exposant de la loi de comportement en loi puissance du composite ($n = 0$ correspond au cas linéaire). L'amélioration est d'autant meilleure que la non-linéarité du comportement est élevée.

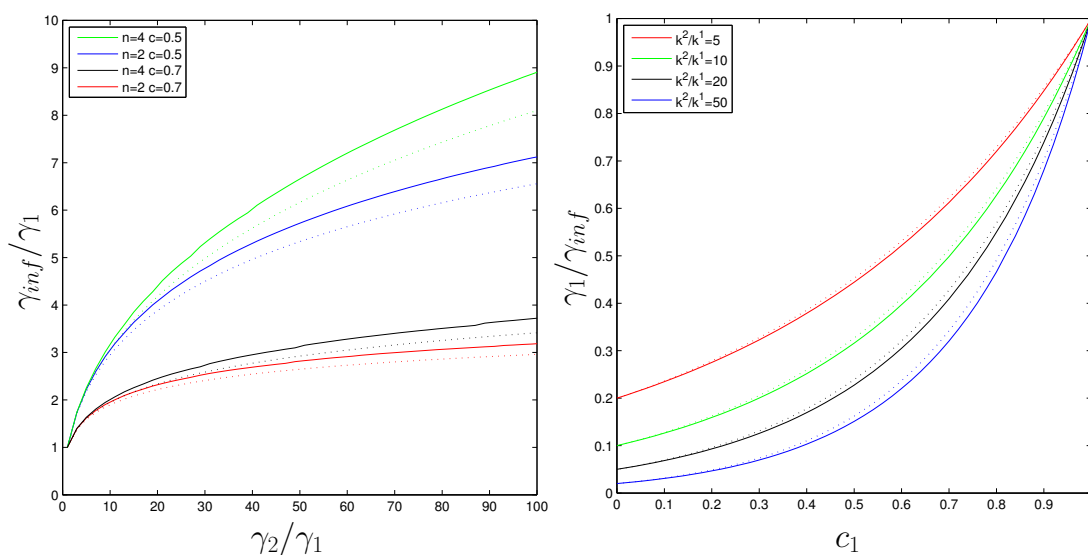


FIGURE 6.7 – Amélioration de la borne inférieure sur la conductivité effective dans le cas bi-phasé (contraste fini).

Les courbes en traits pleins correspondent à la borne inférieure calculée suivant l'approche par immersion ; les courbes en traits pointillés correspondent à la borne issue de la référence [39] utilisant une méthode de type linéaire de comparaison. n désigne l'exposant de la loi de comportement en loi puissance du composite ($n = 0$ correspond au cas linéaire)

Conclusion de la première partie

Dans cette première partie, nous avons ainsi traité un problème d'homogénéisation appliqué à un processus de diffusion linéaire instationnaire dans un milieu fissuré périodique particulier d'un genre original, où les fissures sont de largeur microscopique et de profondeur macroscopique. En suivant une approche par développement asymptotique, on arrive à une formulation du modèle homogénéisé, dit MOSAIC, dans lequel l'effet des fissures microscopiques apparaît sous la forme d'un terme source. Le modèle homogénéisé est encore de type de diffusion, mais un effet de couche limite au voisinage du bord vertical des fissures complique l'écriture du modèle homogénéisé qui ne peut se formuler suivant un unique problème aux limites posé sur l'ensemble du domaine moyen. Le modèle MOSAIC prend ainsi la forme de deux problèmes aux limites, posés dans chacun des deux sous-domaines du milieu homogénéisé, et connectés par des conditions de transmission. Ces conditions traduisent l'effet de la couche limite en reliant la valeur de la solution et de son gradient au voisinage du bord vertical des fissures. Une approche par point fixe est mise en œuvre pour montrer que le modèle MOSAIC admet bien une unique solution.

En comparant notre problème de diffusion au cas de la conductivité en milieu périodique, on remarque que les couplage multi-échelles se manifestent selon différentes formes, suivant la nature du problème traité :

- Dans le cas de la conductivité, il faut résoudre un problème de cellule pour construire la matrice de conductivité homogénéisée.
- Dans notre problème particulier de diffusion linéaire, le couplage multi-échelle se manifeste de façon plus simple, sous la forme d'un terme source proportionnel à la fraction de matériau fissuré. Ceci se rapproche du "terme étrange venu d'ailleurs" de la référence [11].
- Dans le cas de fissures en forme de pointe, on montre que l'effet des fissures induit également une perturbation du coefficient de conductivité dans l'équation homogénéisée.

Une preuve rigoureuse permet de justifier la convergence du problème microscopique vers le modèle MOSAIC. La technique de la preuve est originale : elle repose sur la construction de sommes de Riemann adaptées à la géométrie du problème. La convergence faible permet ensuite de passer à la limite dans les intégrales définissant les formulations faibles du problème exact et du modèle MOSAIC, respectivement.

La pertinence du modèle homogénéisé MOSAIC est illustrée de manière numérique, par comparaison à des simulations directes de configurations fissurées. Deux méthodes sont proposées pour résoudre numériquement le modèle MOSAIC, correspondant à différentes

approches de la couche limite au voisinage du bord vertical des fissures. La couche limite induit en particulier une masse de Dirac dans la formulation faible du modèle homogénéisé. Une technique de résolution par point fixe, consistant à itérer sur la résolution de deux problèmes aux limites connectés par des conditions de transmission, permet de contourner les difficultés liées à la représentation numérique de la singularité au bord et se révèle plus précise.

L'approche par homogénéisation conduit ainsi à une méthode de calcul très générale, qui se couple simplement avec un code de calcul aux Eléments Finis. Elle permet d'aller plus loin que l'approche directe du problème, en rendant possible la simulation du processus de diffusion dans un milieu fissuré périodique dans lequel la largeur des fissures devient arbitrairement petite. En dessous d'une certaine largeur microscopique, le domaine fissuré ne peut plus être maillé et l'approche directe devient infaisable.

Le cas aléatoire est abordé sous la forme de conjectures formelles. Lorsque la largeur des fissures devient une variable aléatoire, on montre que la solution homogénéisée s'exprime suivant l'espérance des solutions des problèmes microscopiques correspondant aux réalisations possibles de la largeur des fissures. La structure du modèle homogénéisé est donc très différente du cas périodique : en particulier, la solution moyenne ne peut plus s'interpréter comme la solution d'un certain problème limite.

Enfin, les configurations de milieux fissurés aléatoires et non-linéaires sont envisagées suivant une approche par bornes. On propose une méthode originale pour borner la conductivité effective en régime non-linéaire. La stratégie repose sur la méthode de translation couplée à l'idée d'immersion, conduisant à un problème d'optimisation non convexe dans un espace de dimension élevée. Une stratégie numérique adaptée au problème d'optimisation est mise en place. Elle permet de calculer l'optimum global précisément en des temps CPU raisonnables. Les bornes ainsi trouvées sur la conductivité effective améliorent les bornes existantes.

Bibliographie

- [1] Y. Achdou, C. Sabot, N. Tchou, **Diffusion and propagation problems in some ramified domains with a fractal boundary**, M2AN Math. Model. Numer. Anal. 40 (2006), no. 4, 623–652
- [2] Yves Achdou, O. Pironneau, and F. Valentin. Effective boundary conditions for laminar flows over periodic rough boundaries. *J. Comput. Phys.*, 147(1) :187–218, 1998.
- [3] G. Allaire. *Homogenization and two-scale convergence*. SIAM J. Math. Anal., 23 :1482–1518, 1992.
- [4] Y. Amirat, O. Bodart, U. De Maio, and A. Gaudiello. Asymptotic approximation of the solution of the Laplace equation in a domain with highly oscillating boundary. *SIAM J. Math. Anal.*, 35(6) :1598–1616 (electronic), 2004.
- [5] Youcef Amirat, Olivier Bodart, Gregory A. Chechkin, and Andrey L. Piatnitski. Boundary homogenization in domains with randomly oscillating boundary. *Stochastic Process. Appl.*, 121(1) :1–23, 2011.
- [6] Youcef Amirat, Olivier Bodart, Umberto De Maio, and Antonio Gaudiello. Effective boundary condition for Stokes flow over a very rough surface. *J. Differential Equations*, 254(8) :3395–3430, 2013.
- [7] A. Bensoussan, J.L Lions, G. Papanicolaou, **Asymptotic analysis of periodic structures**, Studies in Mathematics and its Applications, 5. North-Holland Publishing Co., Amsterdam-New York, 1978.
- [8] Eric Bonnetier, Didier Bresch, and Vuk Milišić. A priori convergence estimates for a rough Poisson-Dirichlet problem with natural vertical boundary conditions. In *Advances in mathematical fluid mechanics*, pp. 105-134, Springer, Berlin, 2010.
- [9] H. Brezis. *Analyse fonctionnelle, théorie et application*, Masson, Paris, 1987.
- [10] D. Cioranescu and P. Donato. *An introduction to homogenization*, volume 17 of Oxford Lecture Series in Mathematics and Its Applications. Oxford University Press, 1999.
- [11] D. Cioranescu, F. Murat. Un terme etrange venu d’ailleurs. (French) [A strange term brought from somewhere else]. *Nonlinear partial differential equations and their applications*. Collège de France Seminar, Vol. II (Paris, 1979/1980), pp. 98-138, 389-390, Res. Notes in Math., 60, Pitman, Boston, Mass.-London, 1982.

- [12] B. Dacorogna. *Direct methods in the calculus of variations*, Springer-Verlag, 1989.
- [13] Anne-Laure Dalibard and David Gérard-Varet. Effective boundary condition at a rough surface starting from a slip condition. *J. Differential Equations*, 251(12) :3450–3487, 2011.
- [14] Anne-Laure Dalibard and Christophe Prange. Well-posedness of the stokes-coriolis system in a half-space over a rough surface. submitted.
- [15] Dautray, Robert and Lions, Jacques-Louis and Artola, Michel and Bardos, Claude and Cessenat, Michel and Kavenoky, Alain and Lascaux, Patrick and Mercier, Bertrand and Pironneau, Olivier and Sentis, Rémi, **Analyse mathématique et calcul numérique pour les sciences et les techniques. Volume 9 : Évolution : numérique, transport. (Mathematical analysis and numerical methods for science and technology. Volume 9 : Evolution : numerical methods, transport equations).** , INSTN Collection Enseignement. Paris etc. : Masson. xxxiv, 1988.
- [16] Z. Ding, A proof of the trace theorem of Sobolev spaces on Lipschitz domains. *Proc. Amer. Math. Soc.* 124 (1996), no. 2, 591–600.
- [17] L. C. Evans, *Partial Differential equations*, Graduate Studies in Mathematics, 19. American Mathematical Society, Providence, RI, 2010.
- [18] Avner Friedman, Bei Hu, and Yong Liu. A boundary value problem for the Poisson equation with multi-scale oscillating boundary. *J. Differential Equations*, 137(1) :54–93, 1997.
- [19] E. Gagliardo, Caratterizzazioni delle tracce sulla frontiera relative ad alcune classi di funzioni in n variabili. (Italian) *Rend. Sem. Mat. Univ. Padova* 27 1957 284–305.
- [20] G. A. Francfort and F. Murat. Homogenization and optimal bounds in linear elasticity. *Arch. Rational Mech. Analysis*, 94 :307–334, 1986.
- [21] F. Hecht, O. Pironneau, A. Le Hyaric, K Ohtsuke, FreeFem++ (manual). [http ://www.freefem.org](http://www.freefem.org), 2007.
- [22] Z. Hashin and S. Shtrikman. A variational approach to the theory of effective magnetic permeability of multiphase materials, *J. Appl. Phys.* 33,3125–3131.
- [23] Willi Jäger and Andro Mikelić. On the roughness-induced effective boundary conditions for an incompressible viscous flow. *J. Differential Equations*, 170(1) :96–122, 2001.
- [24] Willi Jäger and Andro Mikelić. Couette flows over a rough boundary and drag reduction. *Comm. Math. Phys.*, 232(3) :429–455, 2003.
- [25] C. Le Bris. *Systèmes multi-échelles - Modélisation et simulation*, volume 47 of Mathématiques and Applications. Springer-Verlag, Berlin, 2005.
- [26] J.-L. Lions Remarques sur les aspects numériques de la méthode de l’homogénéisation *Etude numérique des grands systèmes*, pp.15–38, Dunod, Paris, 1976.

-
- [27] J.-L. Lions, E. Magenes, *Problèmes aux limites non homogènes et applications*. Vol. 1. (French) Travaux et Recherches Mathématiques, No. 17 Dunod, Paris 1968.
 - [28] K. Lurie and A.V. Cherkaev. Exact estimates of conductivity of composites, *Proc. Royal Soc. Edinburgh*, A99 :71–84, 1984.
 - [29] K. Lurie and A.V. Cherkaev. Optimization of properties of multicomponent isotropic composites. *J. Opt. Theor. Appl.*, 46 :571-580, 1985.
 - [30] Vuk Milišić. Very weak estimates for a rough Poisson-Dirichlet problem with natural vertical boundary conditions. *Methods Appl. Anal.*, 16(2) :157–185, 2009.
 - [31] G. W. Milton. *The Theory of Composites*. volume 6 of Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics. Cambridge University Press, Cambridge, 2002.
 - [32] G. W. Milton. Modelling the properties of composites by laminates in *Homogenization and effective moduli of materials and media*, Springer-Verlag, New York, 1986.
 - [33] Murat F., Tartar L., *Calcul des variations et homogénéisation* in *Les Méthodes de l'Homogénéisation : Théorie et Applications en Physique*, cours de l'Ecole d'Été d'Analyse Numérique ,Eyrolles, Paris,1985.
 - [34] F. Murat. H-convergence. *Séminaire d'Analyse fonctionnelle et numérique*, Univ. Alger, multigraphié, 1978.
 - [35] F. Murat and L. Tartar. H-convergence. In A.V. Cherkaev and R.V. Kohn, editors, *Topics in the Mathematical Modelling of Composites Materials*, volume 31 of Progress in nonlinear differential equations and their applications, pages 21–44. Birkhäuser, 1997.
 - [36] G. Nguetseng. A general convergence result for a functional related to the theory of homogenization. *SIAM J. Math. Anal.*, 20 :608–629, 1989.
 - [37] N. Neuss, M. Neuss-Radu, and A. Mikelic. Effective laws for the Poisson equation on domains with curved oscillating boundaries. *Appl. Anal.*, 85(5) :479–502, 2006.
 - [38] Peigney M., A pattern based method for bounding the effective response of a nonlinear composite, *J. Mech. Phys. Solids*, 53, p.923-948, 2005.
 - [39] P. Ponte Castaneda , The effective mechanical properties of nonlinear isotropic composites, *J. Mech. Phys. Solids*. 39, 45-71, 1991.
 - [40] E. Sanchez-Palencia, Solutions périodiques par rapport aux variables d'espace et applications, *C.R. Acad. Sci.*, 271, 1129-1132, 1970.
 - [41] E. Sanchez-Palencia, Equations aux dérivées partielles dans un type de milieux hétérogènes, *C.R. Acad. Sci.*, 272, 1410-1411, 1970.
 - [42] S. Spagnolo. Sul limite delle soluzioni di problemi de Cauchy relativi all'equazione del calore, *Ann. Sc. Norm. Sup. Pisa*, 21 :657-669, 1967.
 - [43] L. Tartar. Compensated compactness and applications to partial differential equations, in *Nonlinear Analysis and Mechanics, Heriott Watt Symposium*, ed. R. J. Knops, vol. IV, Research Notes in Mathematics, 39 Pitman, pp.136-212.

- [44] L. Tartar. Estimations de coefficients homogénéisés, in *Computing methods in applied sciences and engineering* (Proc. Third Internat. Sympos., Versailles, 1977), volume 704 of Lecture Notes in Math., pages 364–373, Berlin, 1979. Springer.
- [45] L. Tartar. Estimations fines de coefficients homogénéisés, in P. Krée, editor, Ennio De Giorgi Colloquium, volume 125 of Research Notes in Mathematics, pages 168–187, London, 1985. Pitman.
- [46] Talbot D.R.S., Willis J.R., Variational principles for inhomogeneous nonlinear media, *IMA J. Appl. Math*, 35, 39-54, 1985.

Deuxième partie

Approche multi-échelle en cinétique
ionique - Application au transport de
particules suprathermiques dans les
plasmas de fusion

Introduction de la deuxième partie

Les plasmas constituent un exemple de système multi-échelle particulièrement riche. Le milieu est en effet caractérisé par la coexistence d'ions et d'électrons, chaque population étant caractérisée par une échelle de temps qui lui est propre. Les ions sont plus lourds, ($\frac{m_p}{m_e} \sim 1836$) et réagissent à des constantes de temps longues. Aussi, les électrons légers s'ajustent très rapidement sur la dynamique des ions, évoluant ainsi sur des échelles de temps beaucoup plus courtes.

Cette coexistence de plusieurs échelles de temps contrastées dans les plasmas rend leur modélisation particulièrement délicate, spécialement dans un cadre dynamique où le système n'est pas à l'équilibre.

Dans cette seconde partie, on s'intéresse à un problème multi-échelle lié au thème général de la Fusion par Confinement Inertiel (FCI). Les systèmes que l'on étudie en FCI sont des capsules sphériques formées d'hydrogène (deuterium-tritium) initialement cryogénique. La cible est recouverte d'une couche formée d'un matériau transparent (par exemple du CH), que l'on appelle "ablateur", dont la fonction est d'être ablaté par un flux d'énergie incident (flux X s'il s'agit d'une attaque indirecte ou énergie laser s'il s'agit d'une attaque directe). La matière ainsi éjectée lance par effet fusée l'implosion de la capsule, pilotée par la pression d'ablation.

L'objectif de l'implosion est de comprimer la cible d'hydrogène afin que le combustible atteigne le domaine dit "d'ignition" correspondant au dégagement d'énergie par fusion, selon la réaction $D + T \rightarrow \alpha + n + 17.56 \text{ MeV}$. Ce mécanisme est par essence multi-échelle en énergie :

- Les ions dits thermiques D,T, caractérisés par une énergie de l'ordre du keV forment l'essentiel de la masse du plasma en implosion.
- Les particules α suprathermiques, sont créées à 3.52 MeV par les réactions de fusion et interagissent avec les électrons et les ions thermiques du combustible.

En outre, la conception des cibles et l'interprétation des expériences FCI s'appuient en général sur des codes résolvant numériquement des modèles de type fluide ou hydrodynamique. Ce type d'approche est pertinente lorsque le libre parcours des particules est petit devant la longueur caractéristique du système. Si cette condition est bien respectée pour les particules thermiques (ions D,T), ce n'est le cas des particules suprathermiques dont le libre parcours moyen est de l'ordre de la taille caractéristique du système [27]. Une approche *cinétique*, c'est à dire écrite au niveau des fonctions de distribution des particules, est donc a priori requise. Aussi, les effets cinétiques relatifs aux particules thermiques ne sont pas traités rigoureusement dans les codes hydrodynamiques. Les effets de conduction ionique sont modélisés de manière approchée par des formulations locales de type

Spitzer-Braginskii [79, 13]. Les phénomènes de viscosité ionique ne sont pas réellement pris en compte, remplacés artificiellement par un modèle de pseudo-viscosité numérique conçu pour améliorer la robustesse des calculs, en particulier dans les zones de gradient raide. Ces approximations peuvent avoir un impact sur la manière dont se propagent les chocs, influant sur le déroulement de l'implosion et le fonctionnement global des cibles.

Afin de mesurer les conséquences des approximations fluides effectuées usuellement dans les codes hydrodynamiques, et de proposer des améliorations, on met au point une approche complète et auto-consistante du processus de fusion décrit au niveau cinétique ionique. Dans le même temps, on cherche à développer des stratégies efficaces de résolution numérique du système d'équations cinétiques afin que la méthode proposée puisse s'appliquer à des configurations réalistes de cible FCI en de temps calcul raisonnables.

Ce travail s'inscrit dans le prolongement des travaux [18, 80, 51]. Dans la référence [18], les auteurs étudient au niveau cinétique une structure de choc collisionnel dans un plasma tout ionisé. Un modèle cinétique de type Vlasov-Fokker-Planck pour les ions est couplé à un modèle fluide pour les électrons. Le modèle complet est résolu numériquement par le code déterministe FPION. L'étude cinétique du choc met également en évidence l'existence d'une zone de préchauffage électronique de largeur $\sim (m_i/m_e)^{1/2} \lambda_{ii}$ (où λ_{ii} est le libre parcours collisionnel des ions) en amont du front de choc ionique. Dans cette zone de préchauffage, la conductivité électronique domine de sorte que la température électronique se découple de la température ionique. Les fonctions de distribution des ions apparaissent très déformées. Les effets de viscosité ionique et de conductivité ionique sont aussi beaucoup plus importants que ceux calculés par les estimations locales classiques utilisées dans les codes fluides.

Dans les références [80, 51], les auteurs traitent au niveau cinétique ionique des fins d'implosion de configurations réalistes de cibles de FCI, en s'arrêtant à la phase de stagnation. La phase de combustion n'est pas abordée. Aussi, les effets multi-espèces ne sont pas pris en compte, les ions D-T étant traités comme une espèce ionique moyenne de nombre de masse 2.5.

Les contributions originales établies dans cette seconde partie sont les suivantes :

- Dans le but d'étendre la modélisation cinétique aux particules α , une approche multi-échelle en vitesse du processus de ralentissement des produits de fusion est mise en place. Ceci vise en particulier à modéliser rigoureusement le couplage entre les particules α et le bain thermique. La méthode proposée permet alors de traiter finement le processus de thermalisation des produits de fusion, sans passer par l'introduction d'un seuil arbitraire en énergie, en dessous duquel les produits de fusion seraient artificiellement ignorés ou déplacés de manière forcée dans le bain thermique.
- Un formalisme adapté au caractère bimodal de la fonction de distribution des particules α est ensuite développé : on montre qu'une décomposition de l'opérateur de Fokker-Planck appliqué aux produits de fusion permet de séparer les deux échelles de vitesse caractéristiques thermiques/suprathermiques.
- Des algorithmes sont mis au point pour résoudre précisément et efficacement l'équation de Vlasov-Fokker-Planck modélisant la composante suprathermique des particules α , ainsi que le couplage avec l'échelle de vitesse thermique.

-
- L'ensemble de ces algorithmes est alors couplé aux méthodes numériques associées à l'échelle de vitesse thermique des ions et l'échelle électronique reprises du code FPION. L'introduction de l'échelle suprathermique conduit à repenser la structure informatique du code, qui a été rebâti intégralement et de manière adaptée à la simulation numérique de la combustion de configurations de cibles sphériques.
 - Le nouveau code cinétique - appelé FUSE (comme *Fpion Upgrade with two Scales of Energy*) - ainsi construit, est validé sur un ensemble de problèmes de référence pertinents pour la FCI et pour lesquels on dispose de résultats analytiques.
 - La stratégie multi-échelle mise en œuvre permet alors de simuler la fin d'implosion et le processus de combustion de cibles de FCI réalistes au niveau cinétique et en des temps calculs raisonnables. Des effets cinétiques importants dans la phase de convergence du choc et dans la propagation du front de combustion sont ainsi mis en évidence. En particulier, l'approche cinétique révèle qu'une zone de préchauffage se développe en avant du front de combustion principal. On montre que cette structure est étroitement liée au dépôt *non local* de l'énergie et de l'impulsion portées par les produits de fusion.

Le plan de cette seconde partie consacrée à la modélisation cinétique multi-échelle du processus de fusion est le suivant :

- Dans un premier chapitre introductif, on présente les différentes échelles caractéristiques des milieux plasmas, en introduisant la notion de plasma cinétique.
- Puis, au chapitre 2, on montre comment représenter l'ensemble des interactions entre les particules chargées par un modèle moyen, écrit sur les fonctions de distribution à une particule. L'équation de Vlasov-Fokker-Planck est en particulier présentée.
- Le chapitre 3 expose le modèle cinétique complet appliqué au cas du combustible DT de cibles FCI. Il s'agit en fait d'un modèle *hybride*, où les électrons peuvent être approchés par un modèle de type fluide couplé au modèle cinétique régissant les fonctions de distribution associées à chaque espèce d'ions.
- Le chapitre 4 introduit les nouveaux développements effectués pour étendre le modèle cinétique aux particules suprathermiques produites par réactions de fusion. En particulier, on propose une approche *multi-échelle* en énergie (ou de manière équivalent en vitesse), décomposant la fonction de distribution des particules α en la somme d'une composante thermique, évoluant à l'échelle de vitesse thermique et d'une composante dite suprathermique, évoluant sur une échelle de vitesse grande devant l'échelle de vitesse thermique. L'échelle suprathermique correspond ainsi à l'échelle macroscopique du problème.
- Au chapitre 5, on expose une analyse asymptotique du modèle de Fokker-Planck pilotant la phase de ralentissement des particules suprathermiques sur les ions thermiques. Ce chapitre permet en particulier d'établir un lien entre les deux parties du manuscrit.
- Le modèle cinétique complet est ensuite résolu numériquement, au moyen d'un code spécialement développé en C++, le code FUSE, présenté de façon détaillée dans le chapitre 6. On présente en particulier un algorithme déterministe original pour résoudre efficacement et avec précision l'opérateur de Fokker-Planck appliqué aux particules suprathermiques. Une série de cas tests est également présentée afin de

- valider le code en vue de son utilisation sur des configurations réalistes de cible FCI.
- Le chapitre 7 présente une analyse physique des différences constatées entre une simulation hydrodynamique et un calcul cinétique complet effectués sur une même configuration de cible FCI durant l'implosion et la combustion. On met en particulier en évidence une nouvelle phénoménologie dans la propagation de la flamme de combustion, en lien avec des effets de transport *non-local* des particules rapides.

1

Echelles caractéristiques d'un plasma

Sommaire

1.1	Paramètre de couplage	121
1.2	Ecrantage et longueur de Debye	123
1.3	Echelle de temps	123
1.4	Echelle de vitesse	124

Dans un plasma, le nombre N de particules chargées en interaction est très grand, de l'ordre de $\mathcal{N}_{av} \sim 6.10^{23}$ (correspondant au nombre d'Avogadro). Le système est donc caractérisé par un très grand nombre de degrés de liberté. L'étude d'un milieu plasma ne peut donc pas s'aborder selon la démarche de la mécanique classique, consistant à décrire l'évolution déterministe du système, pour un état initial et des conditions limites données.

En effet :

- D'abord, on ne connaît pas les conditions initiales exactes des constituants du système, c'est à dire la position et la vitesse de chaque particule à l'instant initial.
- En outre, même si on pouvait les connaître, on ne pourrait calculer les orbites individuelles de chaque particule (environ 10^{14} dans un plasma de laboratoire typique de quelques dizaines de cm^3 .) Un tel volume de données est en effet inaccessible au traitement et surtout ne présente pas d'intérêt physique, les grandeurs que l'on mesure correspondant à des valeurs moyennes.

Il est donc nécessaire de décrire le milieu par une modélisation moyenne adaptée, intégrant l'effet des corrélations entre les particules chargées de manière approchée. Nous commençons par rappeler succinctement les paramètres caractéristiques des milieux plasmas, cela nous permettant de préciser la notion de plasma cinétique que l'on considérera dans la suite.

1.1 Paramètre de couplage

Le comportement collectif du plasma est lié à la nature longue portée de l'interaction électromagnétique, de sorte qu'une particule donnée est toujours en interaction avec l'ensemble des autres particules, et pas seulement avec les particules les plus proches (comme cela peut être le cas dans un liquide ou dans un gaz neutre).

En première approche, la dynamique d'un plasma est régie par la compétition entre deux phénomènes antagonistes :

- l'agitation thermique, qui tend à désorganiser le système,
- les effets dynamiques et collectifs de l'interaction Coulombienne, qui tendent à organiser les particules chargées.

Le compétition entre l'organisation due à l'agitation thermique et la ré-organisation due aux effets collectifs de l'interaction Coulombienne est représentée par un paramètre sans dimension caractéristique du plasma étudié, que l'on appelle *paramètre de couplage* (ou paramètre plasma) Γ , défini par :

$$\Gamma = \frac{\langle E_p \rangle}{\langle E_k \rangle} \sim \frac{e^2}{T n^{-1/3}}, \quad (1.1)$$

où $\langle E_p \rangle$ désigne l'énergie potentielle moyenne associée à l'interaction électromagnétique, valant (dans le système cgs où $4\pi\epsilon_0 = 1$) :

$$\langle E_p \rangle \sim \frac{e^2}{n^{-1/3}},$$

n étant la densité du plasma (nombre de particules par unité de volume) et e la charge électronique de référence. $n^{-1/3}$ correspond ainsi à la distance moyenne inter-particulaire. Dans l'estimation (1.1), $\langle E_k \rangle$ fait référence à l'énergie moyenne d'agitation thermique, que l'on estime par :

$$\langle E_k \rangle \sim T,$$

où T est la température exprimée en unité d'énergie.

Suivant la valeur du paramètre de couplage (1.1), on peut différencier deux types de plasmas :

- les plasmas faiblement couplés, dit *cinétiques*, pour lesquels $\Gamma \ll 1$, c'est à dire que le désordre provoqué par l'agitation thermique domine,
- les plasmas couplés, fortement *corrélés*, caractérisés par $\Gamma \geq 1$, exhibant alors une structure de type fluide voire cristalline.

Les plasmas couplés relèvent de la physique des milieux condensés. De tels systèmes moléculaires sont décrits en toute généralité par l'équation de Schrödinger permettant de calculer toutes les propriétés du plasma *à l'équilibre*. Les modèles les plus sophistiqués, s'appuyant directement sur une modélisation complète du système sont dits *ab initio* et sont résolus numériquement par des techniques numériques empruntées à la dynamique moléculaire.

Dans le cadre du présent travail, nous nous sommes concentrés sur les plasmas faiblement couplés, dits cinétiques, obéissant à une phénoménologie significativement différente : par exemple, du fait des faibles corrélations internes, le système peut être le siège de développement d'instabilités, pouvant conduire à la turbulence et au chaos. En outre, l'interaction Coulombienne entre les particules chargées du plasma est telle que le milieu présente une tendance à l'auto-organisation, ce qui lui confère des propriétés particulières et qui le distingue des gaz neutres. L'hypothèse de faible corrélation permet alors de réduire la description statistique du milieu, qui intègre l'effet des corrélations microscopiques, dans un formalisme plus souple.

1.2 Ecrantage et longueur de Debye

L'interaction Coulombienne confère au plasma une tendance à la ré-organisation et induit des corrélations spatiales entre les particules chargées qui ne sont pas disposées aléatoirement dans l'espace. En particulier, au voisinage de chaque ion, le nuage électronique a tendance à se densifier du fait de l'attraction Coulombienne. Il s'en suit un phénomène d'*écrantage* du potentiel créé par la charge nue.

Le potentiel électrostatique écranté au voisinage de l'ion test est alors de la forme :

$$\phi(r) = \frac{q}{r} \exp -\frac{r}{\lambda_d}, \quad (1.2)$$

q étant la charge de l'ion-test.

L'écrantage s'exprime en fonction de la *longueur de Debye* λ_d associée aux électrons :

$$\lambda_d = \sqrt{\frac{T}{4\pi n e^2}}, \quad (1.3)$$

La longueur de Debye donne ainsi une mesure de la sphère d'influence d'une particule dans le plasma, et dépend en toute généralité de la vitesse de la particule-test considérée par rapport au plasma.

Cette échelle d'espace représente également la distance typique en dessous de laquelle les phénomènes de *séparation de charges* d'espace peuvent exister. Pour des distances supérieures à la longueur de Debye, le plasma peut être vue comme une structure quasi-neutre. Autrement dit, la longueur de Debye correspond à une échelle spatiale de corrélation des fluctuations de densité.

Jusqu'à présent, nous n'avons considéré que l'effet d'écran lié à la déformation du nuage électronique. En fait, il existe aussi un phénomène d'écrantage lié aux ions de sorte que leur distribution ne peut plus être considérée comme aléatoire dans l'espace. La longueur de Debye doit donc tenir compte des corrélations ioniques à l'équilibre. On estime alors λ_D par :

$$\lambda_D = \left(4\pi n_e e^2 / T_e + \sum_{j=1}^n 4\pi n_j Z_j^2 e^2 / T_j \right)^{-1/2}, \quad (1.4)$$

où T_j est la température associée à chaque espèce d'ions et Z_j le numéro atomique de l'espèce d'ions j .

1.3 Echelle de temps

On peut enfin définir une échelle de temps associée aux corrélations de fluctuations de densité. Il s'agit de la *fréquence plasma* (ou fréquence de Langmuir) correspondant à l'échelle de temps de la réponse de la structure électronique soumise à une perturbation initiale, la réponse électronique étant vue comme une superposition d'oscillations. On montre en effet (voir par exemple [72]) qu'un petit déplacement perturbatif des électrons par rapport à leur état d'équilibre induit une force de rappel qui tend à annuler la

perturbation initiale. Ce comportement de type diélectrique ("les effets s'opposent aux causes qui leur donnent naissance"), induit une oscillation de la structure électronique du plasma, à la pulsation ω_p :

$$\omega_p = \sqrt{\frac{4\pi n e^2}{m_e}}, \quad (1.5)$$

m_e étant la masse de l'électron. Le temps caractéristique $\sim \omega_p^{-1}$ donne une échelle temporelle électronique de référence.

1.4 Echelle de vitesse

Les plasmas peuvent être le siège d'ondes acoustiques, dites ioniques, qui sont pilotées par l'effet du champ électrique induisant la propagation des surpressions et dépressions au sein du milieu, dont l'inertie est essentiellement formée par les ions. La réponse ionique est alors caractérisée par une échelle de vitesse, dite vitesse acoustique ionique :

$$c_s = \sqrt{\frac{T_e}{m_i}}, \quad (1.6)$$

où m_i est la masse des ions. Les ondes acoustiques ioniques traduisent la réponse du plasma à une perturbation lente de pression ou de vitesse.

Ces différentes échelles de temps, de longueur et de vitesse traduisent le caractère multi-échelle des milieux plasmas. En s'appuyant sur ces échelles représentant les réponses collectives du plasma, on peut construire un modèle adapté à l'échelle d'intérêt d'un problème spécifique. Dans le cadre des plasmas cinétiques, faiblement couplés, il est possible de réduire la description complète du plasma, basée sur la fonction de distribution à N particules, à un modèle approché plus simple, exploitant le fait que les corrélations entre les particules chargées sont faibles. Le modèle obtenu, dit de Vlasov-Fokker-Planck, s'exprime au moyen de la fonction de distribution à une particule. L'équation de Vlasov-Fokker-Planck nous servira de brique élémentaire dans la construction d'un modèle cinétique appliqué au combustible de cibles FCI.

2

Réduction statistique et équation de Vlasov-Fokker-Planck

Sommaire

2.1	Description complète du problème à N corps - équation de Liouville .	126
2.1.1	Fonction de distribution à N particules	126
2.1.2	Réduction statistique	127
2.1.3	Application aux plasmas cinétiques	130
2.2	Modélisation des collisions Coulombiennes	131
2.2.1	Calcul de la déviation angulaire	132
2.2.2	Section efficace différentielle	133
2.2.3	Prédominance des petites déviations - notion de logarithme Coulombien	134
2.3	Equation de Fokker Planck	137
2.3.1	Développement limité	137
2.3.2	Retour sur le cas Coulombien	139
2.3.3	Formulation différentielle : notion de potentiels de Rosenbluth	143
2.3.4	Formulation intégrale de Landau	144
2.4	Propriétés de l'opérateur de Fokker-Planck et réduction fluide	145
2.4.1	Définition de l'état d'équilibre	145
2.4.2	Propriétés générales de l'opérateur de collision	146
2.4.3	Moments hydrodynamiques	147
2.4.4	Equations fluides	148

Les propriétés et les processus d'un milieu plasma peuvent être abordés suivant deux approches :

- L'approche macroscopique (ou fluide),
- L'approche microscopique (ou cinétique).

L'approche macroscopique cherche à décrire l'évolution en temps et en espace de grandeurs moyennes, correspondant aux moments hydrodynamiques tels que la vitesse moyenne ou la température. Ces grandeurs correspondent également aux observables expérimentales

auxquelles on peut avoir accès dans les expériences de mesure de propriétés des plasmas. La description microscopique d'un plasma est basée sur la fonction de distribution des particules du plasma. Elle prend en compte les corrélations microscopiques entre ces particules et l'effet des micro-champs générés par les particules chargées. Les quantités microscopiques sont plus difficiles à mesurer directement, mais elles peuvent jouer un rôle dominant sur les propriétés macroscopiques du milieu. C'est en particulier le cas dans les fronts de choc [18], qui jouent un rôle crucial dans la mise en condition des cibles de FCI. Dans les structures de choc, les fonctions de distribution peuvent être loin de l'équilibre ; les effets cinétiques sont alors tels que le choc peut être beaucoup plus large que ne le prédit un modèle fluide. Les effets microscopiques dans la zone choquée peuvent ainsi influencer les grandeurs macroscopiques.

En outre, l'approche cinétique fournit un cadre rigoureux pour l'étude des effets associés aux collisions microscopiques entre les particules chargées et pour le calcul des coefficients de transport (conductivité, viscosité...) d'un plasma.

L'état microscopique d'un plasma (ou plus généralement d'un système à N -corps) est complètement décrit par la fonction de distribution à N particules $f^{(N)}$ fonction des vitesses et positions de chaque particule individuelle. $f^{(N)}$ satisfait l'équation de Liouville, qui traduit la conservation du nombre de particules.

Nous exposons dans ce chapitre les principes de la réduction statistique s'appliquant aux plasmas cinétiques. Ceci s'effectue par intégrations successives sur les coordonnées associées aux $N - 1, N - 2, \dots$ particules du système. Dans le cadre des plasmas cinétiques de fusion, tels que le point chaud d'une cible FCI, les corrélations sont faibles. Cette hypothèse permet alors de fermer la hiérarchie d'équations cinétiques, par exemple en s'arrêtant aux corrélations à deux particules et en négligeant les corrélations à trois particules. Les corrélations à deux particules correspondent aux collisions proches, pilotées par l'interaction Coulombienne. En revenant au processus microscopique de la collision Coulombienne, on montre comment aboutir à l'équation de Vlasov-Fokker-Planck régissant l'évolution des fonctions de distribution à une particule. En particulier, l'opérateur de Fokker-Planck traduit la prédominance des collisions à petite déviation angulaire. L'équation de Vlasov-Fokker-Planck nous servira de brique élémentaire pour construire une modélisation cinétique que l'on cherchera à résoudre numériquement en vue de simuler des configurations réalistes de cibles de Fusion par Confinement Inertiel. Ce chapitre s'appuie sur les traités [47], [78].

2.1 Description complète du problème à N corps - équation de Liouville

2.1.1 Fonction de distribution à N particules

La description microscopique complète d'un système de N particules est basée par la fonction de distribution à N particules $f^{(N)}$ définie par :

$$f^{(N)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N; \vec{p}_1, \vec{p}_2, \dots, \vec{p}_N, t)$$

évoluant dans l'espace des phases (position ; impulsion) à N particules.

$f^{(N)}$ représente la probabilité de trouver la particule 1 à la position \vec{r}_1 avec l'impulsion \vec{p}_1 , la particule 2 à la position \vec{r}_2 avec l'impulsion \vec{p}_2 , etc...

S'agissant d'une probabilité, $f^{(N)}$ vérifie la condition de normalisation :

$$\int f^{(N)} d\Gamma^{(N)} = 1,$$

où $d\Gamma^{(N)} = d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N d\vec{p}_1 d\vec{p}_2 \dots d\vec{p}_N$ est l'élément de volume de l'espace des phases à N particules.

La conservation du nombre de particules dans l'espace des phases implique que :

$$\frac{\partial f^{(N)}}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial \vec{r}_i} \cdot (\vec{v}_i f^{(N)}) + \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial \vec{p}_i} \cdot \left(\frac{d\vec{p}_i}{dt} f^{(N)} \right) = 0. \quad (2.1)$$

On suppose que la dynamique des particules individuelles est Hamiltonienne, c'est à dire qu'il existe une fonction $H(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N; \vec{p}_1, \vec{p}_2, \dots, \vec{p}_N)$ telle que, pour chaque particule i :

$$\begin{cases} \vec{v}_i = \frac{d\vec{r}_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} \\ \frac{d\vec{p}_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{r}_i} \end{cases}$$

L'Eq. (2.1) peut alors se récrire sous la forme de l'équation de Liouville :

$$\frac{\partial f^{(N)}}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \vec{v}_i \cdot \frac{\partial f^{(N)}}{\partial \vec{r}_i} + \sum_{i=1}^N \frac{d\vec{p}_i}{dt} \cdot \frac{\partial f^{(N)}}{\partial \vec{p}_i} = 0. \quad (2.2)$$

L'équation de Liouville (2.2) exprime la conservation de $f^{(N)}$ le long des trajectoires suivies dans l'espace des phases.

En considérant la fonction de distribution comme une fonction $f^{(N)}(\vec{r}_i, \vec{v}_i, t)$, l'équation de Liouville s'écrit :

$$\frac{\partial f^{(N)}}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \vec{v}_i \cdot \frac{\partial f^{(N)}}{\partial \vec{r}_i} + \sum_{i=1}^N \vec{a}_i \cdot \frac{\partial f^{(N)}}{\partial \vec{v}_i} = 0, \quad (2.3)$$

où \vec{a}_i représente l'accélération de la particule i sous l'effet du champ électrique \vec{E} et magnétique \vec{B} :

$$\vec{a}_i = \frac{q_i}{m_i} \left(\vec{E} + \frac{\vec{v}_i \times \vec{B}}{c} \right).$$

2.1.2 Réduction statistique

A partir de la description complète du système basée sur l'équation de Liouville (2.3) écrite sur la fonction de distribution à N particules $f^{(N)}$, on opère une réduction statistique en calculant les fonctions de distribution à s particules ($s < N$), définies par :

$$f^{(s)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_s; \vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_s, t) = \int f^{(N)} d\vec{r}_{s+1} d\vec{r}_{s+2} \dots d\vec{r}_N d\vec{v}_{s+1} d\vec{v}_{s+2} \dots d\vec{v}_N. \quad (2.4)$$

La fonction de distribution réduite $f^{(s)}$ correspond ainsi à l'intégration de $f^{(N)}$ sur les positions et les impulsions portées par les particules $s + 1, \dots, N$.

En particulier, la description la plus simple des corrélations met en jeu la fonction de distribution à une particule, définie pour une espèce de particules α par :

$$f_\alpha(\vec{r}, \vec{v}, t) = N_\alpha \int f^{(N)} d\vec{r}_2 d\vec{r}_3 \dots d\vec{r}_N d\vec{v}_2 d\vec{v}_3 \dots d\vec{v}_N, \quad (2.5)$$

N_α étant le nombre de particules de l'espèce α .

On a la condition de normalisation sur f_α :

$$\int f_\alpha(\vec{r}, \vec{v}, t) d\vec{r} d\vec{v} = N_\alpha.$$

La densité de particules α dans l'espace réel s'obtient naturellement par intégration de la fonction de distribution :

$$n_\alpha(\vec{r}) = \int f_\alpha(\vec{r}, \vec{v}, t) d\vec{v}.$$

Pour obtenir une équation d'évolution sur la fonction de distribution à une particule f_α , on intègre l'équation de Liouville (2.3) sur les $N - 1$ particules. On obtient :

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \vec{v}_1 \cdot \frac{\partial f_\alpha}{\partial \vec{r}_1} + N_\alpha \int \vec{a}_1 \cdot \frac{\partial f^{(N)}}{\partial \vec{v}_1} d\vec{r}_2 d\vec{r}_3 \dots d\vec{r}_N d\vec{v}_2 d\vec{v}_3 \dots d\vec{v}_N = 0. \quad (2.6)$$

Remarque 2.1.1 Pour passer de (2.3) à (2.6), on utilise d'une part la condition :

$$\int d\vec{r}_2 \frac{\partial}{\partial \vec{r}_2} \cdot \left(\int \vec{v}_2 d\vec{v}_2 f^{(N)} \right) = 0.$$

Cette quantité représente en effet le flux net de particules à la frontière du domaine, et est donc nulle par conservation du nombre total de particules. D'autre part, on utilise :

$$\int d\vec{v}_2 \frac{\partial f^{(N)}}{\partial \vec{v}_2} = 0,$$

en supposant que la fonction de distribution s'annule pour des vitesses infinies.

On décompose ensuite l'accélération de la façon suivante :

$$\vec{a}_1 = \vec{a}_1^e + \sum_j \vec{a}_{1j},$$

où \vec{a}_1^e représente l'accélération de la particule 1 sous l'action des champs extérieurs éventuels, et \vec{a}_{1j} désigne l'accélération de la particule 1 induite par l'interaction Coulombienne avec la particule j .

Le troisième terme du membre gauche de l'équation (2.6), proportionnel à l'accélération totale de la particule 1 \vec{a}_1 peut alors se décomposer suivant :

$$\int \vec{a}_1 \cdot \frac{\partial f^{(N)}}{\partial \vec{v}_1} d\Gamma^{(N-1)} = \vec{a}_1^e \cdot \frac{\partial f_\alpha}{\partial \vec{v}_1} + \sum_{j=2}^N N_\alpha \int \vec{a}_{1j} \cdot \frac{\partial f^{(N)}}{\partial \vec{v}_1} d\Gamma^{(N-1)}, \quad (2.7)$$

avec $d\Gamma^{(N-1)} = d\vec{r}_2 d\vec{r}_3 \dots d\vec{r}_N d\vec{v}_2 d\vec{v}_3 \dots d\vec{v}_N$.

En séparant les N particules du système en des groupes de N_β particules de même espèce β (dans le cas des plasmas à plusieurs espèces de particules), le deuxième terme du membre de droite de l'Eq.(2.7) peut se partitionner selon :

$$\sum_{j=2}^N \int \vec{a}_{1j} \cdot \frac{\partial f^{(N)}}{\partial \vec{v}_1} d\Gamma^{(N-1)} = \sum_{\beta} N_\beta \int \vec{a}_{1\beta} \cdot \frac{\partial f^{(N)}}{\partial \vec{v}_1} d\Gamma^{(N-1)}.$$

En effet, comme toutes les particules d'une même espèce β sont identiques, on a :

$$\sum_{j=2}^N \int \vec{a}_{1j} f^{(N)} d\Gamma^{(N-1)} = \sum_{\beta} N_\beta \int \vec{a}_{1\beta} f^{(N)} d\Gamma^{(N-1)}.$$

On introduit alors la fonction de distribution à deux particules, définie par :

$$f_{\alpha\beta}(\vec{r}_\alpha, \vec{r}_\beta, \vec{v}_\alpha, \vec{v}_\beta, t) = N_\alpha N_\beta \int f^{(N)} d\vec{r}_3 d\vec{r}_4 \dots d\vec{r}_N d\vec{v}_3 d\vec{v}_4 \dots d\vec{v}_N, \quad (2.8)$$

pour finalement écrire le troisième terme de l'équation (2.6) suivant :

$$\vec{a}_1^e \cdot \frac{\partial f_\alpha}{\partial \vec{v}_1} + \sum_{j=2}^N \int \vec{a}_{1j} \cdot \frac{\partial f^{(N)}}{\partial \vec{v}_1} d\Gamma^{(N-1)} = \vec{a}_1^e \cdot \frac{\partial f_\alpha}{\partial \vec{v}_1} + \sum_{\beta} \int \vec{a}_{1\beta} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{v}_1} f_{\alpha\beta}(\vec{r}_1, \vec{r}_\beta, \vec{v}_1, \vec{v}_\beta, t) d\vec{r}_\beta d\vec{v}_\beta. \quad (2.9)$$

L'évolution de la fonction de distribution à une particule est donc fonction de la fonction de distribution à deux particules. On pourrait montrer de même que la fonction de distribution à deux particules, nécessite la connaissance de la fonction de distribution à trois particules... On fait ainsi apparaître une hiérarchie d'équations, où la fonction de distribution à s particules est pilotée par la fonction de distribution à $s + 1$ particules. Cette hiérarchie porte le nom de hiérarchie B.B.G.K.Y¹⁰ [10, 11, 45, 46, 81].

La fonction de distribution à deux particules définie par (2.8), s'interprète comme la probabilité de trouver une particule de l'espèce α en $(\vec{r}_\alpha, \vec{v}_\alpha)$, et une particule β en $(\vec{r}_\beta, \vec{v}_\beta)$. Si les positions et vitesses des deux particules sont statistiquement indépendantes, on a :

$$f_{\alpha\beta} = f_\alpha f_\beta$$

10. Bogolyubov, Born, Green, Kirkwood et Yvon

2.1.3 Application aux plasmas cinétiques

Dans un plasma cinétique, les corrélations sont par définition faibles. Il est alors suffisant de ne prendre en compte que les corrélations à deux points, sous la forme :

$$f_{\alpha\beta} = f_{\alpha}f_{\beta} + g_{\alpha\beta}, \quad (2.10)$$

ce qui ferme naturellement la hiérarchie B.B.G.K.Y, en négligeant les corrélations à trois particules.

Remarque 2.1.2 *Signalons ici la spécificité du milieu plasma, caractérisé par l'interaction Coulombienne à **longue** portée, par rapport au gaz neutre caractérisé par une interaction à **courte** portée. Dans un gaz neutre de faible densité n , la portée r_0 de la force d'interaction est très petite devant la distance moyenne inter-particule $n^{-1/3}$. Il est alors naturel de développer les fonctions de corrélation en fonction du petit paramètre nr_0^3 pour fermer la hiérarchie d'équations cinétiques. Dans un plasma, il est aussi possible de fermer la hiérarchie d'équations cinétiques par une relation de type (2.10), bien que la portée de l'interaction Coulombienne r_0 , de l'ordre de la longueur de Debye λ_D , soit plus **grande** que la distance inter-particule $n^{-1/3}$. La situation est donc complètement opposée à celle du gaz. Le petit paramètre pertinent par rapport auquel s'effectue le développement des fonctions de corrélation est ici :*

$$g = \frac{1}{n\lambda_D^3} \ll 1.$$

On peut alors montrer que, dans la limite où $g \ll 1$, ce qui revient à supposer qu'il y a un grand nombre de particules à l'intérieur de la sphère de Debye de rayon λ_D , la fonction de corrélation à deux particules $g_{\alpha\beta}$ est petite devant $f_{\alpha}f_{\beta}$. L'équation de fermeture (2.10) constitue une bonne approximation.

Dans l'approximation (2.10), la fonction de distribution à une particule f_{α} est alors régie par :

$$\frac{\partial f_{\alpha}}{\partial t} + \vec{v}_1 \cdot \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial \vec{r}_1} + \left(\vec{a}_1^e + \sum_{\beta} \int \vec{a}_{1\beta} f_{\beta} d\vec{r}_{\beta} d\vec{v}_{\beta} \right) \cdot \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial \vec{v}_1} = - \sum_{\beta} \int \vec{a}_{1\beta} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{v}_1} g_{\alpha\beta} d\vec{r}_{\beta} d\vec{v}_{\beta}, \quad (2.11)$$

où l'on a reporté l'effet des corrélations à deux particules dans le membre de droite.

Dans le dernier terme du membre de gauche de l'Eq. (2.11), on remarque que le terme $\partial f_{\alpha} / \partial \vec{v}_1$ est factorisé, tandis que l'autre facteur correspondant à l'accélération peut s'écrire en fonction des champs électro-magnétiques, solutions des équations de Maxwell. Pour expliciter le terme d'accélération, on décompose les champs totaux en deux contributions, en écrivant :

$$\begin{cases} \vec{E} = \vec{E}_{ext} + \langle \vec{E}_{int} \rangle \\ \vec{B} = \vec{B}_{ext} + \langle \vec{B}_{int} \rangle \end{cases} \quad (2.12)$$

Dans la décomposition (2.12), les contributions $\langle \vec{E}_{int} \rangle$ et $\langle \vec{B}_{int} \rangle$ désignent les champs moyens liés aux interactions internes du plasma, tandis que \vec{E}_{ext} et \vec{B}_{ext} désignent les éventuels champs extérieurs imposés.

Les champs moyens sont donnés par les équations de Maxwell moyennées :

$$\begin{cases} \vec{\nabla} \cdot \langle \vec{E}_{int} \rangle = 4\pi \langle \rho_{int} \rangle \\ \vec{\nabla} \times \langle \vec{B}_{int} \rangle = \frac{4\pi}{c} \langle \vec{J}_{int} \rangle + \frac{1}{c} \frac{\partial \langle \vec{E}_{int} \rangle}{\partial t} \end{cases} \quad (2.13)$$

Les densités de courant et de charge internes au plasma (qui sont les sources des champs) sont définies à partir des fonctions de distribution à une particule selon :

$$\begin{cases} \langle \rho_{int} \rangle = \sum_{\beta} q_{\beta} \int f_{\beta} d\vec{v} \\ \langle \vec{J}_{int} \rangle = \sum_{\beta} q_{\beta} \int f_{\beta} \vec{v} d\vec{v}. \end{cases} \quad (2.14)$$

En récrivant l'Eq. (2.11) à l'aide des champs électro-magnétiques totaux, on arrive à l'équation cinétique suivante pour une espèce de particules α :

$$\frac{\partial f_{\alpha}}{\partial t} + \vec{v}_1 \cdot \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial \vec{r}_1} + \frac{q_{\alpha}}{m_{\beta}} \left(\vec{E} + \frac{\vec{v}_1 \times \vec{B}}{c} \right) \cdot \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial \vec{v}_1} = - \sum_{\beta} \int \vec{a}_{1\beta} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{v}_1} g_{\alpha\beta} d\vec{r}_{\beta} d\vec{v}_{\beta}. \quad (2.15)$$

Le contribution des champs électro-magnétiques dans le membre de gauche de l'équation (2.15) traduit l'action des particules lointaines, situées à une distance grande devant l'échelle de Debye λ_D . En outre, le membre de droite de l'équation cinétique (2.15) correspond aux interactions relativement proches, mettant en œuvre des particules distantes de moins de la longueur de Debye. On parle alors de contribution due aux collisions proches, et on écrit de façon générale :

$$\left[\frac{\partial f_{\alpha}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial \vec{r}} + \frac{q_{\alpha}}{m_{\alpha}} \left(\vec{E} + \frac{\vec{v} \times \vec{B}}{c} \right) \cdot \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial \vec{v}} - \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial t} \right]_{coll}. \quad (2.16)$$

On cherche ensuite à expliciter la forme des termes de collisions apparaissant dans l'équation cinétique (2.16). Pour ce faire, on étudie le mécanisme sous-jacent de collisions entre deux particules chargées. On montre que le processus microscopique est en fait dominé par les collisions à petites déviations angulaires ; cela nous permet de modéliser les termes de collision par un opérateur différentiel de type Fokker-Planck apparaissant dans le membre de droite de l'Eq. (2.16).

2.2 Modélisation des collisions Coulombiennes

Dans un plasma tout ionisé (ce qui est le cas du combustible DT d'une cible de fusion), les interactions entre les particules chargées sont de nature Coulombienne. La décroissance en $\frac{1}{r}$ du potentiel Coulombien est telle que la force qui en dérive agit sur de longues distances. Une particule donnée interagit alors simultanément avec un très grand nombre d'autres particules chargées.

On rappelle dans cette section les résultats principaux relatifs à la modélisation des collisions dans un plasma cinétique, de manière à expliciter la forme de la fonction de corrélation à deux particules de l'Eq. (2.16).

2.2.1 Calcul de la déviation angulaire

On considère deux particules chargées de masse m_1 et m_2 et de charge q_1 et q_2 . On désigne par \vec{r}_1 et \vec{r}_2 leur position dans le référentiel du laboratoire. On suppose que ces particules entrent en collision de manière élastique par l'intermédiaire de l'interaction Coulombienne.

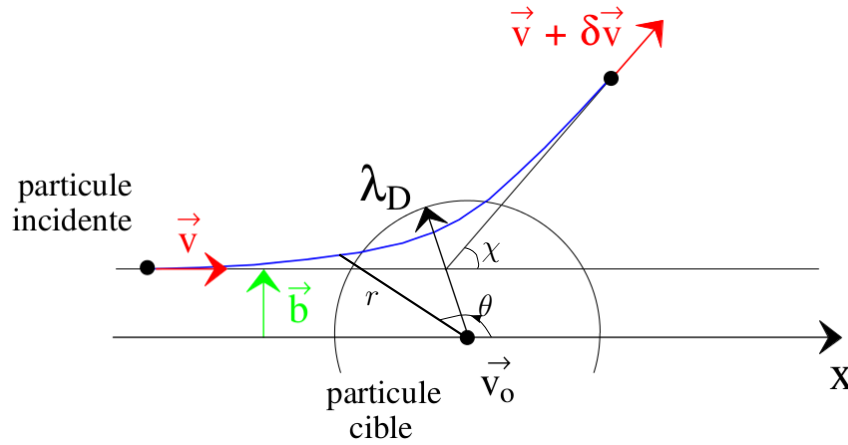


FIGURE 2.1 – Collision entre deux particules chargées en interaction Coulombienne

Le système des deux particules étant supposé isolé, on peut remplacer l'étude du mouvement des deux particules en interaction dans le référentiel du laboratoire par l'étude de la particule fictive de masse μ et de coordonnées polaire (r, θ) observée dans le référentiel du centre de masse (voir Fig.2.1). Ecrivons alors la conservation du moment cinétique et de l'énergie totale dans le référentiel du centre de masse :

$$\mu b v_0 = \mu r^2 \dot{\theta} \quad (2.17)$$

$$\frac{1}{2} \mu v_0^2 = \frac{1}{2} \mu (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2) + \Phi(r), \quad (2.18)$$

avec $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ la masse réduite du système et

$$\varphi(r) = \frac{q_1 q_2}{\|\vec{r}_1 - \vec{r}_2\|},$$

l'énergie potentielle d'interaction Coulombienne.

Remarque 2.2.1 *A très courte distance, l'interaction entre particules chargées est pilotée non plus par l'interaction Coulombienne (dont le potentiel diverge lorsque $r \rightarrow 0$),*

mais par les forces nucléaires de nature quantique, généralement répulsives et variant très rapidement avec la distance entre particules. Néanmoins, dans un plasma tout ionisé, l'essentiel des interactions se fait par le jeu des interactions Coulombiennes se traduisant du point de vue de particule test par une série de petites déviations.

A partir des équations de conservation (2.17) et (2.18), on déduit l'équation de la trajectoire de la particule fictive :

$$\frac{dr}{d\theta} = \frac{r^2}{b} \left(1 - \frac{b^2}{r^2} - 2 \frac{\varphi(r)}{\mu v_0^2} \right)^{1/2}, \quad (2.19)$$

écrite pour une vitesse initiale v_0 et un paramètre d'impact b .

Soit r_m la distance minimale d'approche et θ_m l'angle polaire correspondant. Une condition nécessaire est que r_m annule le membre de droite de l'équation de la trajectoire (2.19).

L'angle polaire θ_m correspondant à la distance d'approche minimale vérifie alors :

$$\theta_m = \pi - b \int_{r_m}^{\infty} \frac{dr/r^2}{\left(1 - \frac{b^2}{r^2} - 2 \frac{\varphi(r)}{\mu v_0^2} \right)^{1/2}}.$$

L'angle de déviation χ après la collision (voir Fig.2.1) est finalement :

$$\chi = 2\theta_m - \pi = \pi - 2b \int_{r_m}^{\infty} \frac{dr/r^2}{\left(1 - \frac{b^2}{r^2} - 2 \frac{\varphi(r)}{\mu v_0^2} \right)^{1/2}},$$

L'intégrale se calcule explicitement avec $\varphi(r) = \frac{q_1 q_2}{r}$.

L'angle de déviation associé à une collision peut ainsi s'exprimer sous la forme :

$$\tan\left(\frac{\chi}{2}\right) = \frac{q_1 q_2}{\mu v_0^2 b}. \quad (2.20)$$

2.2.2 Section efficace différentielle

On introduit la section efficace différentielle de collision élastique $\sigma(\chi)$ que l'on définit de la façon suivante : pour un flux de particules incidents F_0 , le nombre de particules déviées suivant un petit angle solide $d\Omega$ autour de la direction de déviation χ vérifie :

$$dN = F_0 \sigma d\Omega.$$

En supposant la symétrie azimutale, le nombre de particules déviées s'écrit :

$$dN = F_0 \sigma(\chi) 2\pi \sin \chi d\chi.$$

Or, une particule est déviée suivant l'angle χ à $d\chi$ près si elle arrive avec un certain paramètre d'impact b à db près. Le nombre de particules diffusées s'écrit donc aussi :

$$dN = F_0 2\pi b db.$$

On obtient ainsi l'expression générale de la section efficace différentielle en fonction du paramètre d'impact b et de l'angle de déviation χ :

$$\sigma(\chi) = \frac{b}{\sin \chi} \frac{db}{d\chi}.$$

Pour l'interaction Coulombienne, en reprenant la relation sur l'angle de déviation Eq.(2.20), on obtient l'expression de la section efficace de diffusion de Rutherford :

$$\sigma(\chi) = \left(\frac{q_1 q_2}{2\mu v_0^2 \sin^2 \chi/2} \right)^2. \quad (2.21)$$

Remarquons que la loi de renvoi de la collision induite par (2.21) n'est pas isotrope : la diffusion de Rutherford est caractérisée par l'importance des *collisions rasantes*. La trajectoire de la particule test incidente est ainsi principalement modifiée par une succession de collisions, caractérisées par une petite déviation angulaire. Cette hypothèse est centrale pour établir l'opérateur de Fokker-Planck. Nous la développons plus en détail au paragraphe suivant, en introduisant en particulier la notion de logarithme Coulombien.

2.2.3 Prédominance des petites déviations - notion de logarithme Coulombien

Considérons une particule chargée test (de charge $Z_1 e$) se transportant dans un plasma tout ionisé. Durant son trajet, la particule est déviée par un ion de charge $Z_2 e$. Pour que la particule test soit déviée d'un angle $\Delta\chi$ fixé, deux mécanismes collisionnels sont envisageables :

- une succession de petites déviations $\delta\chi_i$, vérifiant Eq.(2.20) et tels que $\Delta\chi = \sum_i \delta\chi_i$,
- une collision à grand angle, déviant directement la particule test de l'angle $\Delta\chi$.

Nous allons montrer que le premier processus est dominant, toujours en se plaçant dans l'hypothèse d'un plasma tout ionisé.

Pour cela, on considère une série de petites déviations et on cherche à estimer l'angle de déviation moyen. S'agissant d'une marche aléatoire symétrique, l'espérance de la déviation est nulle :

$$\langle \Delta\chi \rangle \sim 0.$$

La moyenne du carré de la déviation $\langle \Delta\chi^2 \rangle$ est en fait la grandeur pertinente à estimer :

$$\langle \Delta\chi^2 \rangle = \int \chi^2 F(\Delta\chi) d(\Delta\chi),$$

où $F(\Delta\chi)d(\Delta\chi)$ est le nombre de collisions provoquant la déviation $\Delta\chi$ à $d\Delta\chi$ près. Ce nombre de collisions s'exprime en fonction de la distance parcourue par la particule test L et de son paramètre d'impact b :

$$F(\Delta\chi)d(\Delta\chi) = n_2 L 2\pi b db,$$

où n_2 est la densité de cibles (de charge Z_2e) avec lesquelles la particule test entre en collision.

En utilisant Eq.(2.20), la déviation moyenne vérifie :

$$\langle \Delta\chi^2 \rangle = \frac{8\pi Z_1^2 Z_2^2 e^4 n_2 L}{\mu^2 v_0^4} \int \frac{db}{b}. \quad (2.22)$$

Dans le calcul de $\langle \Delta\chi^2 \rangle$, il apparaît une intégrale divergente sur le paramètre d'impact $\int \frac{db}{b}$. Cette divergence est en fait intimement liée à la nature longue portée de l'interaction Coulombienne.

Pour empêcher la divergence de l'intégrale $\int \frac{db}{b}$ lorsque $b \rightarrow \infty$, on introduit le paramètre d'impact maximum b_{max} correspondant à un angle de déviation minimum χ_{min} . Jusqu'à présent, le calcul de $\langle \Delta\chi^2 \rangle$ a été effectué en supposant implicitement que les charges étaient distribuées aléatoirement dans l'espace. Or, on sait que chaque ion est en fait entouré d'un nuage électronique écraneur qui est tel que l'action de l'ion considéré sur la particule cible est atténuée au delà de la longueur de Debye $\lambda_D = \left(\frac{T_e}{4\pi n_0 e^2} \right)^{1/2}$.

On considère ainsi que :

- Si le paramètre d'impact vérifie $b < \lambda_D$, la particule test voit le potentiel nu $\sim \frac{q_2}{r}$, q_2 étant la charge du noyau diffuseur. La particule est alors notablement déviée suivant un angle donné par la relation de Rutherford (2.21).
- Si $b > \lambda_D$, on considère que le potentiel du centre diffuseur est totalement écranté : la particule test ne voit alors plus la particule cible et il n'y a plus de déviation.

Cela revient à tronquer l'intégrale $\int \frac{db}{b}$ au paramètre d'impact $b_{max} = \lambda_D$.

Pour la divergence en 0, on exclut les petites valeurs du paramètre d'impact de sorte que l'angle de déviation $\Delta\chi \sim 1/b$ reste petit. On fixe une borne haute sur χ :

$$\left(\frac{\chi}{2} \right)_{\max} \sim 1,$$

de façon à déduire simplement une borne basse sur b :

$$b_{\min} \sim \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\mu v_0^2}.$$

On simplifie usuellement cette borne basse en utilisant l'approximation $\mu v_0^2 \sim 3k_b T$, de sorte que le choix du minimum pour b est :

$$b_{\min} = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{3k_b T}.$$

Pour l'instant, nous avons négligé les effets quantiques pouvant jouer lorsque le paramètre d'impact devient petit. Ainsi, si le paramètre d'impact $\frac{Z_1 Z_2 e^2}{\mu v_0^2}$ est inférieur à la longueur de Broglie, cette dernière doit être choisie comme valeur pour b_{\min} .

Finalement, la déviation angulaire moyenne vérifie :

$$\langle \Delta\chi^2 \rangle = \left(\frac{8\pi n_2 Z_1^2 Z_2^2 e^4}{\mu^2 v_0^4} \text{Log} \Lambda \right) L, \quad (2.23)$$

où l'on introduit le logarithme Coulombien $\text{Log}\Lambda$ défini par :

$$\text{Log}\Lambda = \int_{b_{\min}}^{b_{\max}} \frac{db}{b} = \text{Log} \left(\frac{b_{\max}}{b_{\min}} \right). \quad (2.24)$$

La déviation angulaire augmente donc avec la longueur parcourue L , ce qui est intuitif. Fixant $\langle \Delta\chi^2 \rangle = 1$, on obtient une estimation de la longueur à parcourir par la particule test pour qu'elle soit déviée au cours de sa marche aléatoire d'un angle total $\pi/2$:

$$L_{\pi/2} \sim \left(\frac{8\pi n_2 Z_1^2 Z_2^2 e^4}{\mu^2 v_0^4} \text{Log}\Lambda \right)^{-1},$$

de sorte que la section efficace équivalente, définie par : $\sigma_{\pi/2}^m = 1/(n_2 L_{\pi/2})$, est donnée par :

$$\sigma_{\pi/2}^m \sim \frac{8\pi Z_1^2 Z_2^2 e^4}{\mu^2 v_0^4} \text{Log}\Lambda.$$

Cette section efficace traduit une déflexion totale égale à $\pi/2$ par une *accumulation* de petites collisions multiples (c'est le sens de l'exposant m dans l'écriture $\sigma_{\pi/2}^m$).

Par ailleurs, on peut définir une section efficace de collision à grand angle $\sigma_{\pi/2}^s$, correspondant à une déviation angulaire égale à $\pi/2$ à la suite d'une *seule* collision à grand angle (désignée par un exposant s dans la notation) :

$$\sigma_{\pi/2}^s = \pi b_0^2,$$

où b_0 est le paramètre d'impact correspondant à une déviation égale à $\pi/2$. En se reportant à l'Eq.(2.20), on peut estimer la section efficace de collision à grand angle par :

$$\sigma_{\pi/2}^s = \pi \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{\mu v_0^2} \right)^2.$$

Finalement, le rapport des sections efficaces $\sigma_{\pi/2}^m$ sur $\sigma_{\pi/2}^s$ est :

$$\frac{\sigma_{\pi/2}^m}{\sigma_{\pi/2}^s} \sim 8 \text{Log}\Lambda. \quad (2.25)$$

Ce rapport dépend donc faiblement de la quantité $\Lambda = b_{\max}/b_{\min}$. Dans le cas des plasmas de fusion à forte température (comme le point chaud d'une cible de fusion FCI, où $T \sim 7$ keV), $\text{Log}\Lambda$ varie faiblement dans la gamme 10-20. Ainsi, une collision à grand angle est environ cent fois moins probable qu'une déviation produite par une série de petites déviations angulaires. Cette prédominance des petites déviations permet de modéliser les processus collisionnels par l'opérateur de Fokker-Planck.

Remarque 2.2.2 La coupure introduite en $b_{\max} = \lambda_D$ apparaît ainsi comme une approximation permettant de contourner le calcul de la diffusion avec le potentiel écranté $\phi(r) \sim -(\frac{e^2}{r}) \exp(-\frac{r}{\lambda_D})$, fait de manière exacte dans la théorie de Lenard-Balescu [4], [55]. Les approximations faites pour les coupures de l'intégrale divergente étant dans un

facteur logarithmique, la valeur numérique du logarithme Coulombien ne dépend que faiblement du choix de b_{\max} et de b_{\min} . Aussi, la théorie exacte de Lenard-Balescu montre que la théorie simplifiée que l'on vient de présenter reste une bonne approximation, tout en étant beaucoup plus simple à établir et à manipuler.

Remarque 2.2.3 A partir de la section efficace différentielle (2.21), on peut aussi calculer la section efficace de transfert de quantité de mouvement en intégrant sur l'angle solide :

$$\sigma_{mv} = \int_{\chi_{\min}}^{\pi} (1 - \cos \chi) \sigma(\chi) 2\pi \sin \chi d\chi. \quad (2.26)$$

Dans l'intégration (2.26), on introduit une pondération en $1 - \cos \chi$ pour isoler la contribution de la quantité de mouvement parallèle à la vitesse initiale.

L'intégration effectuée sur χ donne ainsi :

$$\sigma_{mv} = 4\pi b_0^2 \log \frac{1}{\sin \chi_{\min}/2},$$

ou encore, en reprenant le paramètre d'impact maximal,

$$\sigma_{mv} \approx 4\pi b_0^2 \log \frac{b_{\max}}{b_0}. \quad (2.27)$$

La section efficace de transfert de quantité de mouvement σ_{mv} calculée en (2.27) est en fait reliée à la resistivité du plasma, et est donc nécessairement une grandeur finie. Cela est donc cohérent avec l'introduction de coupures pour que l'intégrale Coulombienne $\int \frac{db}{b}$ reste finie.

2.3 Equation de Fokker Planck

La théorie de Fokker-Planck est appropriée pour calculer les phénomènes de transport dans un plasma complètement ionisé, où dominant les collisions *faibles* caractérisées par de petites déviations $\Delta v \ll v$, hypothèse valable dans le cadre des plasmas cinétiques. L'opérateur de collision prend alors la forme d'une divergence dans l'espace des vitesses. Il est calculé à partir des fonctions de distribution à une particule $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$ associées à chaque espèce de particules chargées présentes dans le plasma.

2.3.1 Développement limité

La forme de l'équation de Fokker-Planck peut s'obtenir par un développement de Taylor à l'ordre deux effectué par rapport à $\Delta \vec{v}$ et à Δt . Dans la mesure où la théorie s'applique dans la limite où les déviations $\Delta \vec{v}$ sont petites ($\Delta v \ll v$), cela fait sens de considérer $\Delta \vec{v}$ comme un petit incrément.

On introduit alors la quantité $P(\vec{v}, \Delta \vec{v}, \Delta t)$ qui est la probabilité pour qu'une particule de vitesse \vec{v} acquière la vitesse $\vec{v} + \Delta \vec{v}$ au temps Δt . La fonction de distribution au temps t , $f(\vec{v}, t)$, est obtenue à partir de la fonction de distribution à l'instant $t - \Delta t$ par :

$$f(\vec{v}, t) = \int f(\vec{v} - \Delta\vec{v}, t - \Delta t) P(\vec{v}, \Delta\vec{v}, \Delta t) d(\Delta\vec{v}), \quad (2.28)$$

où l'on omet les variables d'espace pour alléger les notations.

Sachant que les collisions ne provoquent que de faibles déviations, et si Δt est choisi suffisamment petit, on peut développer (2.28) en fonction de $\Delta\vec{v}$ et Δt . En ne gardant que les termes d'ordre inférieur ou égal à deux en $\Delta\vec{v}$, et à un en Δt , on obtient :

$$f(\vec{v}, t) = \int \left\{ f(\vec{v}, t) P(\vec{v}, \Delta\vec{v}) - \Delta t \frac{\partial f}{\partial t}(\vec{v}, t) P(\vec{v}, \Delta\vec{v}) - \Delta\vec{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{v}} [f(\vec{v}, t) P(\vec{v}, \Delta\vec{v})] + \frac{1}{2} \Delta\vec{v} \otimes \Delta\vec{v} : \nabla_v^2 [f(\vec{v}, t) P(\vec{v}, \Delta\vec{v})] \right\} d(\Delta\vec{v}), \quad (2.29)$$

la probabilité $P(\vec{v}, \Delta\vec{v})$ étant normalisée :

$$\int P(\vec{v}, \Delta\vec{v}) d(\Delta\vec{v}) = 1.$$

Dans le développement limité (2.29), on a utilisé les notations usuelles suivantes :

– Pour deux vecteurs \vec{u} et \vec{v} , $\vec{u} \otimes \vec{v}$ désigne la matrice 3×3 dont les coefficients sont :

$$(\vec{u} \otimes \vec{v})_{ij} = u_i v_j.$$

– Pour deux matrices 3×3 A et B , le produit contracté $A : B$ est donné par :

$$A : B = \sum_{i,j} A_{ij} B_{ij},$$

ce qui correspond à la trace de AB .

– Pour une fonction régulière F de \mathbb{R}^3 dans \mathbb{R} , on définit la matrice 3×3 $\nabla^2 F$ dite Hessienne de F par :

$$(\nabla^2 F)_{ij} = \frac{\partial^2 F}{\partial_i \partial_j}.$$

En outre, la distribution ne varie que sous l'effet des collisions, de sorte que l'on peut écrire (2.29) sous la forme :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll.} = \int \left(-\frac{\Delta\vec{v}}{\Delta t} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{v}} (fP) + \frac{1}{2} \frac{\Delta\vec{v} \otimes \Delta\vec{v}}{\Delta t} : \nabla_v^2 (fP) \right) d(\Delta\vec{v}).$$

Dans l'équation précédente, on peut sortir la distribution $f(\vec{v}, t)$ de l'intégrale sur $\Delta\vec{v}$, de manière à écrire (2.29) suivant :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll.} = -\frac{\partial}{\partial \vec{v}} \cdot \left[\left\langle \frac{\Delta\vec{v}}{\Delta t} \right\rangle f(\vec{v}, t) \right] + \frac{1}{2} \nabla_v^2 : \left[\left\langle \frac{\Delta\vec{v} \otimes \Delta\vec{v}}{\Delta t} \right\rangle f(\vec{v}, t) \right], \quad (2.30)$$

où l'on pose :

$$\langle \frac{\Delta \vec{v}}{\Delta t} \rangle = \int P(\vec{v}, \Delta \vec{v}) \frac{\Delta \vec{v}}{\Delta t} d(\Delta \vec{v}), \quad (2.31)$$

et

$$\langle \frac{\Delta \vec{v} \otimes \Delta \vec{v}}{\Delta t} \rangle = \int P(\vec{v}, \Delta \vec{v}) \frac{\Delta \vec{v} \otimes \Delta \vec{v}}{\Delta t} d(\Delta \vec{v}). \quad (2.32)$$

L'équation (2.30) correspond à la forme générale de Fokker-Planck s'écrivant comme la divergence dans l'espace des vitesses d'un courant de ralentissement. Ce courant est la somme de deux contributions :

- le premier terme dans le membre de droite de (2.30) correspond à une friction dynamique, traduisant une advection dans l'espace des vitesses avec un taux proportionnel à $\langle \Delta \vec{v} \rangle$.
- le second terme est un terme de diffusion en vitesse, piloté par la matrice de diffusion $\langle \Delta \vec{v} \otimes \Delta \vec{v} \rangle$. Cette contribution modélise en particulier un phénomène d'isotropisation de la fonction de distribution qui tend à "s'étaler" dans l'espace des vitesses.

2.3.2 Retour sur le cas Coulombien

La forme générale de l'opérateur de Fokker-Planck (2.30) a été établie sans tenir compte de la nature précise des interactions microscopiques. Elle repose simplement sur l'hypothèse que les déviations sont faibles. Il s'agit maintenant d'explicitier le calcul des moyennes (2.31) et (2.32) pour particulariser l'équation de Fokker-Planck au cas de l'interaction Coulombienne.

Pour les calculer, on procède en deux étapes :

- D'abord, on fixe une vitesse \vec{w} et on calcule la moyenne d'échange de vitesses entre la particule test de vitesse \vec{v} et toutes les particules cibles ayant la vitesse \vec{w} .
- On prend ensuite la moyenne du résultat obtenu en faisant varier \vec{w} .

Commençons donc par fixer une vitesse \vec{w} pour les particules cibles β . Supposons que la particule test α de vitesse \vec{v} arrive sur une particule cible de vitesse \vec{w} avec un paramètre d'impact b .

On sait alors que l'angle de déviation χ correspondant est :

$$\chi = \frac{2Z_\alpha Z_\beta e^4}{\mu |u|^2 b},$$

où on introduit $\vec{u} = \vec{v} - \vec{w}$ la vitesse relative entre les particules test et cible et μ la masse réduite correspondante.

A partir de l'angle de déviation χ , on peut calculer la variation de vitesse de \vec{u} à l'issue de la collision.

Soit \vec{u}' la vitesse relative après collision.

Dans le repère orthonormé $(\vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$, avec $\vec{i} = \frac{\vec{u}}{|\vec{u}|}$, les coordonnées de la variation de la vitesse relative sont (voir Fig.2.2) :

$$\Delta \vec{u} = \begin{pmatrix} -2u \sin^2(\chi/2) \\ 2u \sin(\chi/2) \sin \phi \\ 2u \sin(\chi/2) \cos \phi \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} -u\chi^2/2 \\ u\chi \sin \phi \\ u\chi \cos \phi \end{pmatrix} \quad (2.33)$$

où ϕ désigne l'angle azimutal.

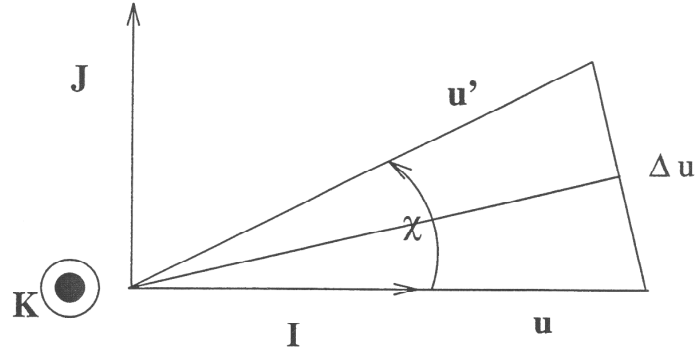


FIGURE 2.2 – Composantes de la variation $\Delta \vec{u}$ du vecteur vitesse relative.

Sachant que la vitesse du centre de masse reste constante lors de la collision, la variation de vitesse $\Delta \vec{v}$ de la particule test vérifie :

$$\Delta \vec{v} = \frac{m_\beta}{m_\alpha + m_\beta} \Delta \vec{u} = \frac{\mu}{m_\alpha} \Delta \vec{u}, \quad (2.34)$$

m_α étant la masse de la particule test, m_β celle de la particule cible et μ la masse réduite des deux particules.

Pendant le temps Δt , la particule test α se déplaçant à la vitesse \vec{v} balaye une distance $|\vec{v} - \vec{w}| \Delta t$ par rapport à toutes les particules de vitesse \vec{w} . Le nombre de particules cibles β de vitesse \vec{w} rencontrées avec un paramètre d'impact b à db près et suivant un angle azimutal ϕ à $d\phi$ près est donc :

$$f_\beta(\vec{w}, t) d^3 w \cdot |\vec{v} - \vec{w}| \Delta t \cdot b d\phi db,$$

(où la fonction de distribution f_β est telle que $\int f_\beta d^3 v = n_\beta$.)

En moyennant sur ϕ , la deuxième et troisième composante de Δv s'annule. En calculant maintenant la moyenne sur le paramètre d'impact b , à \vec{w} fixée et en notant $\langle \Delta \vec{v} \rangle_{\vec{w}}$, on a :

$$\langle \Delta \vec{v} \rangle_{\vec{w}} = -\pi \Delta t |\vec{v} - \vec{w}| (\vec{v} - \vec{w}) f_\beta(\vec{w}, t) \left(\int \chi^2(b) b db \right) d^3 w,$$

puisque $(\Delta \vec{v})_w$ est porté par le vecteur $\vec{i} = \frac{\vec{u}}{|\vec{u}|}$ avec $\vec{u} = \vec{v} - \vec{w}$.

En prenant la moyenne par rapport à \vec{w} , on obtient donc :

$$\left\langle \frac{\Delta \vec{v}}{\Delta t} \right\rangle = -\pi \int |\vec{v} - \vec{w}| (\vec{v} - \vec{w}) f_\beta(\vec{w}, t) \left(\int \chi^2(b) b db \right) d^3 w. \quad (2.35)$$

On procède de la même manière pour calculer la moyenne de la matrice $\Delta \vec{v} \otimes \Delta \vec{v}$. Fixons une vitesse \vec{w} pour la particule cible. On calcule alors la moyenne de $\Delta \vec{u} \otimes \Delta \vec{u}$ dans le repère $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ précédemment défini. L'intégration sur l'angle azimutal ϕ conduit tout d'abord à :

$$\langle \Delta u_i \Delta u_j \rangle = 0 \quad \text{avec} \quad i \neq j.$$

Le terme Δu_1^2 est en χ^4 , et comme on suppose χ petit, on peut considérer que :

$$\Delta u_1^2 \sim 0.$$

Il ne reste que deux termes à calculer, à savoir $\langle \frac{\Delta u_2^2}{\Delta t} \rangle_{\vec{w}}$ et $\langle \frac{\Delta u_3^2}{\Delta t} \rangle_{\vec{w}}$, qui sont égaux entre eux et s'expriment dans la base $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ selon :

$$\left\langle \frac{\Delta u_2^2}{\Delta t} \right\rangle_{\vec{w}} = \left\langle \frac{\Delta u_3^2}{\Delta t} \right\rangle_{\vec{w}} = \pi |\vec{v} - \vec{w}|^3 n_\beta f_\beta(\vec{w}, t) \int \chi^2(b) b db.$$

La matrice $\left\langle \frac{\Delta \vec{u} \otimes \Delta \vec{u}}{\Delta t} \right\rangle_{\vec{w}}$ est ainsi proportionnelle à la matrice de la projection orthogonale sur le plan perpendiculaire au vecteur $\vec{u} = \vec{v} - \vec{w}$. En revenant dans le référentiel du laboratoire selon (2.34), on peut donc écrire :

$$\left\langle \frac{\Delta \vec{v} \otimes \Delta \vec{v}}{\Delta t} \right\rangle_{\vec{w}} = \left(\frac{\mu}{m_\alpha} \right)^2 \pi |\vec{v} - \vec{w}|^3 f_\beta(\vec{w}, t) \left(\int \chi^2(b) b db \right) \left(\text{Id} - \frac{(\vec{v} - \vec{w}) \otimes (\vec{v} - \vec{w})}{|\vec{v} - \vec{w}|^2} \right), \quad (2.36)$$

où Id désigne la matrice identité.

On pose :

$$\Phi(\vec{u}) = \frac{1}{|\vec{u}|} \left(\text{Id} - \frac{\vec{u} \otimes \vec{u}}{|\vec{u}|^2} \right). \quad (2.37)$$

On a alors l'identité remarquable, avec $\vec{u} = \vec{v} - \vec{w}$:

$$\frac{\partial^2 |\vec{u}|}{\partial v_i \partial v_j} = \frac{|\vec{u}| \delta_{ij} - u_i u_j / |\vec{u}|}{|\vec{u}|^2} = \Phi(\vec{u}). \quad (2.38)$$

En reprenant la relation de Rutherford (2.21) exprimant l'angle de déviation χ en fonction du paramètre d'impact b , on obtient finalement l'expression suivante pour le terme de friction dynamique :

$$\left\langle \frac{\Delta \vec{v}}{\Delta t} \right\rangle = -4\pi \left(\frac{q_\alpha q_\beta}{m_\alpha} \right)^2 \frac{m_\alpha}{\mu} \left(\int \frac{db}{b} \right) \int \frac{\vec{v} - \vec{w}}{|\vec{v} - \vec{w}|^3} f_\beta(\vec{w}, t) d^3 w, \quad (2.39)$$

tandis que le terme de diffusion est donné par :

$$\left\langle \frac{\Delta \vec{v} \otimes \Delta \vec{v}}{\Delta t} \right\rangle = 4\pi \left(\frac{q_\alpha q_\beta}{m_\alpha} \right)^2 \left(\int \frac{db}{b} \right) \int (\vec{v} - \vec{w}) \Phi(\vec{v} - \vec{w}) f_\beta(\vec{w}, t) d^3 w. \quad (2.40)$$

(f_β est la fonction de distribution des cibles).

En utilisant l'identité (2.38), et en sortant les dérivées selon \vec{v} de l'intégrale sur \vec{w} , ce coefficient de diffusion peut aussi s'écrire suivant :

$$\langle \frac{\Delta v_i \Delta v_j}{\Delta t} \rangle = 4\pi \left(\frac{q_\alpha q_\beta}{m_\alpha} \right)^2 \left(\int \frac{db}{b} \right) \frac{\partial^2}{\partial v_i \partial v_j} \int |\vec{v} - \vec{w}| f_\beta(\vec{w}, t) d^3 w. \quad (2.41)$$

Ces coefficients traduisent la diffusion dans l'espace des vitesses d'un faisceau de particules test sous l'effet des petites déviations. Le coefficient $\langle \Delta \vec{v} \rangle$ représente la friction dynamique, tandis que le coefficient $\langle \Delta \vec{v} \otimes \Delta \vec{v} \rangle$ correspond à la dispersion du faisceau des particules test (voir Fig.2.3 pour une illustration qualitative).

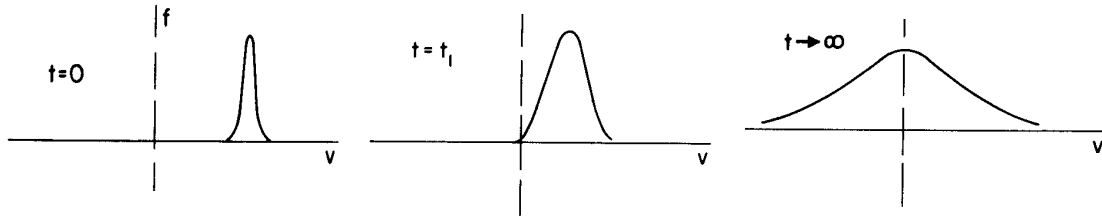


FIGURE 2.3 – Effet de l'opérateur de Fokker-Planck sur les fonctions de distribution

On retrouve dans les expressions (2.39) et (2.41) l'intégrale $\int \frac{db}{b}$ qui diverge en 0 et en $+\infty$. En reprenant les approximations relatives à définition du logarithme Coulombien (2.24), on obtient finalement le terme général de collision d'une espèce α (particule test) sur une espèce β (particule cible) sous la forme :

$$\frac{1}{\Gamma_{\alpha\beta}} \left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} \right)_{\text{coll}} = -\frac{\partial}{\partial \vec{v}} \cdot \left(f_\alpha \frac{\partial h}{\partial \vec{v}} \right) + \frac{1}{2} \nabla_v^2 : (f_\alpha \nabla_v^2 g), \quad (2.42)$$

où $\Gamma_{\alpha\beta} = \frac{4\pi q_\alpha^2 q_\beta^2}{m_\alpha^2} \text{Log} \Lambda$ et où l'on introduit les *potentiels de Rosenbluth* [75], relatifs à la fonction de distribution des particules cibles β .

- Pour le terme de friction dynamique, on a :

$$h(\vec{v}) = \sum_\beta \frac{m_\alpha + m_\beta}{m_\beta} h_\beta(\vec{v}),$$

où le premier potentiel de Rosenbluth associé à l'espèce cible β est défini par :

$$h_\beta(\vec{v}) = \int f_\beta(\vec{w}) \frac{1}{|\vec{v} - \vec{w}|} d^3 w. \quad (2.43)$$

- Pour le terme de diffusion en vitesse, on a :

$$g(\vec{v}) = \sum_\alpha g_\alpha(\vec{v}),$$

où le second potentiel de Rosenbluth associé aux cibles β vérifie la forme intégrale :

$$g_\beta(\vec{v}) = \int f_\beta(\vec{w}) |\vec{v} - \vec{w}| d^3w. \quad (2.44)$$

2.3.3 Formulation différentielle : notion de potentiels de Rosenbluth

Les relations intégrales définissant les potentiels de Rosenbluth sont en fait des produits de convolution dans l'espace des vitesses et peuvent se récrire sous la forme d'un système d'équations de Poisson. Plus précisément, la forme intégrale (2.43) est équivalente à :

$$\Delta_v h_\beta = -4\pi f_\beta. \quad (2.45)$$

De même, on peut montrer que la formulation intégrale (2.44) définissant le second potentiel de Rosenbluth g_β est équivalente à :

$$\Delta_v g_\beta = -2h_\beta. \quad (2.46)$$

En outre, les particules dites "tests" indicées suivant α ont été ainsi artificiellement distinguées des autres particules du plasma. Elles peuvent aussi être identiques aux particules cibles β du membre droite de l'équation (2.42). Les termes de collision correspondant deviennent alors non-linéaires et traduisent une relaxation collisionnelle de la fonction de distribution sur elle-même.

Dans la résolution numérique de l'opérateur de collisions, nous adopterons une écriture du terme de collision sous la forme d'une divergence dans l'espace des vitesses, cela nous permettant d'en déduire simplement un schéma numérique conservatif vis à vis du nombre de particules. Nous écrivons le courant de ralentissement sous une forme légèrement différente mais équivalente à la forme (2.42) :

$$\left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} \right)_{\text{coll}} = \frac{\partial}{\partial \vec{v}} \cdot \left[f_\alpha \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial \vec{v}} - \nabla^2 \mathcal{T} \cdot \frac{\partial f_\alpha}{\partial \vec{v}} \right], \quad (2.47)$$

où l'on pose :

$$\mathcal{S} = \sum_\beta 4\pi \Gamma_{\alpha\beta} \frac{m_\alpha}{m_\beta} \mathcal{S}_\beta,$$

et

$$\mathcal{T} = \sum_\beta 4\pi \Gamma_{\alpha\beta} \frac{m_\alpha}{m_\beta} \mathcal{T}_\beta,$$

avec :

$$\Gamma_{\alpha\beta} = \frac{q_\alpha^2 q_\beta^2}{m_\alpha^2} \text{Log} \Lambda.$$

Les potentiels \mathcal{S}_β et \mathcal{T}_β , que nous appellerons encore potentiels de Rosenbluth même s'ils diffèrent légèrement de leur forme originale, sont définis par :

$$\Delta_v \mathcal{S}_\beta = f_\beta, \quad \text{et} \quad \Delta_v \mathcal{T}_\beta = \mathcal{S}_\beta. \quad (2.48)$$

Les potentiels ainsi définis dans (2.48) sont liés aux potentiels de Rosenbluth originaux h_β et g_β définis en (2.43) et (2.44) respectivement par les relations :

$$\mathcal{S}_\beta = -\frac{h_\beta}{4\pi}, \quad \text{et} \quad \mathcal{T}_\beta = -\frac{g_\beta}{8\pi}. \quad (2.49)$$

Cette formulation est équivalente à celle de la référence de Rosenbluth et al. [75].

2.3.4 Formulation intégrale de Landau

En utilisant le fait que :

$$\frac{\partial}{\partial \vec{v}} \cdot \left(\int \Phi(\vec{v} - \vec{w}) f(\vec{w}) d^3 w \right) = \int \Phi(\vec{v} - \vec{w}) \frac{\partial f}{\partial \vec{w}} d^3 w, \quad (2.50)$$

où Φ est définie par l'Eq. (2.37), on peut transformer la forme de Rosenbluth (2.42) pour l'opérateur de Fokker-Planck en une forme totalement symétrique appelée forme de Landau :

$$\left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} \right)_{\text{coll}} = \frac{\partial}{\partial \vec{v}} \cdot \left[\sum_\beta \frac{2\pi q_\alpha^2 q_\beta^2 \text{Log} \Lambda}{m_\alpha^2} \int \left(f_\beta(\vec{w}) \frac{\partial f_\alpha}{\partial \vec{v}}(\vec{v}) - \frac{m_\alpha}{m_\beta} f_\alpha(\vec{v}) \frac{\partial f_\beta}{\partial \vec{w}}(\vec{w}) \right) \Phi(\vec{v} - \vec{w}) d^3 w \right] \quad (2.51)$$

On peut aussi écrire l'intégrale de Landau en fonction des impulsions $\vec{p}_\alpha = m_\alpha \vec{v}_\alpha$ (resp. $\vec{p}_\beta = m_\beta \vec{v}_\beta$) des particules tests α (resp. des particules cibles β) de façon à obtenir une forme équivalente à (2.51) :

$$\left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} \right)_{\text{coll}} = \frac{\partial}{\partial \vec{p}_\alpha} \cdot \left[\sum_\beta 2\pi q_\alpha^2 q_\beta^2 \text{Log} \Lambda \int \left(f_\beta(\vec{p}_\beta) \frac{\partial f_\alpha}{\partial \vec{p}_\alpha}(\vec{p}_\alpha) - f_\alpha(\vec{p}_\alpha) \frac{\partial f_\beta}{\partial \vec{p}_\beta}(\vec{p}_\beta) \right) \Phi(\vec{v}_\alpha - \vec{v}_\beta) d^3 p_\beta \right] \quad (2.52)$$

L'opérateur de collision prend ainsi la forme d'une divergence dans l'espace des vitesses. Le courant de ralentissement apparaît comme une intégrale symétrique en f_α et f_β . Cette forme, appelée intégrale de Landau, a été publiée pour la première fois en 1936 dans la référence [48]. Cette formulation est en particulier bien adaptée pour dériver les propriétés de conservation associées à l'opérateur de Fokker-Planck. Notons que cette intégrale prend en compte les effets collectifs du plasma au travers du paramètre d'impact maximal $b_{\text{max}} \sim \lambda_D$, qui est beaucoup plus grande que la distance entre particules $d \sim \frac{1}{n^{1/3}}$, n étant la densité de particules. Les fluctuations des champs électriques opérant entre les distances d et λ_D sont ainsi moyennées dans le terme de collision (2.52).

2.4 Propriétés de l'opérateur de Fokker-Planck et réduction fluide

Pour décrire les propriétés générales de l'opérateur de Fokker-Planck, nous repartons de l'équation cinétique complète décrivant un plasma collisionnel multi-espèce où l'on inclut les termes de l'équation de Vlasov en prenant en compte la force de Lorentz :

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial f_\alpha}{\partial \vec{r}} + \frac{q_\alpha}{m_\alpha} \left(\vec{E} + \frac{\vec{v} \times \vec{B}}{c} \right) \cdot \frac{\partial f_\alpha}{\partial \vec{v}} = \sum_\beta \mathcal{C}_{\alpha\beta} [f_\alpha, f_\beta], \quad (2.53)$$

où l'on désigne par $\mathcal{C}_{\alpha\beta} [f_\alpha, f_\beta]$ l'opérateur de collisions de la distribution de particules tests α sur les particules cibles β .

2.4.1 Définition de l'état d'équilibre

Considérons un plasma homogène soumis à aucune force. L'équation cinétique (2.53) devient alors :

$$\sum_\beta \mathcal{C}_{\alpha\beta} = 0,$$

ce qui conduit à :

$$\mathcal{C}_{\alpha\beta} = 0, \text{ pour tout } \beta.$$

En examinant l'intégrale de Landau dans (2.52), cela impose que le vecteur :

$$\vec{G}_{\alpha\beta} = \frac{\partial \text{Log} f_\alpha}{\partial \vec{p}_\alpha} - \frac{\partial \text{Log} f_\beta}{\partial \vec{p}_\beta},$$

soit colinéaire au vecteur vitesse relative $\vec{u} = \vec{v}_\alpha - \vec{v}_\beta$ de manière à annuler le noyau de l'intégrale de Landau (2.52). Il s'en suit que :

$$\frac{\partial \text{Log} f_\alpha}{\partial \vec{p}_\alpha} \propto \vec{v}_\alpha = \frac{\partial \epsilon_\alpha}{\partial \vec{p}},$$

où ϵ_α désigne l'énergie cinétique de la particule α .

Ainsi,

$$\text{Log} f_\alpha = -\frac{\epsilon_\alpha}{k_b T} + \text{cste}_\alpha.$$

On retrouve bien le fait que la distribution de Maxwell-Boltzmann, plus précisément définie par :

$$f_{M\alpha}(v) = \frac{n_\alpha}{(2\pi v_{\alpha,th}^2)^{3/2}} \exp -\frac{|\vec{v} - \vec{u}_\alpha|^2}{2v_{\alpha,th}^2}, \quad (2.54)$$

est solution d'équilibre (ou solution stationnaire) de l'équation cinétique (2.53). Dans la définition de la Maxwellienne (2.54), n_α désigne la densité de particules α , \vec{u}_α est la vitesse moyenne des particules, et $v_{\alpha,th}$ est la vitesse thermique définie par :

$$v_{\alpha,th} = \sqrt{\frac{k_b T_\alpha}{m_\alpha}},$$

T_α étant la température associée aux particules α . Notons qu'à l'équilibre, toutes les espèces du plasma sont à la même température.

2.4.2 Propriétés générales de l'opérateur de collision

Quelle que soit la forme exacte du terme de collision employé au second membre de l'équation cinétique, quelques propriétés générales, examinées ci-dessous, doivent être assurées.

Positivité

La fonction de distribution doit rester partout positive sous l'effet du terme de collision. Ceci peut être difficile à assurer numériquement de façon stricte, en particulier selon le type de condition aux limites adoptées dans l'espace des vitesses.

Relations de conservation

Les collisions doivent conserver la masse, l'impulsion et l'énergie totales. Notons que ceci sera plus ou moins difficile à assurer numériquement ; en pratique, il sera toujours assez facile de conserver la masse en mettant le terme de collision discrétisé sous la forme de la divergence d'un flux¹¹, mais beaucoup plus difficile d'assurer la conservation numérique de l'impulsion et de l'énergie. Des schémas numériques conservant explicitement les trois quantités existent (voir par exemple [57], [25]), mais en contrepartie ils peuvent présenter d'autres propriétés indésirables, comme des problèmes d'oscillations non-physiques de la fonction de distribution.

Théorème H et second principe

On doit pouvoir démontrer pour l'équation cinétique munie de son terme de collision ce qu'il est convenu d'appeler un "théorème H", qui exprime que l'entropie ne doit pas décroître sous l'effet des collisions (on souhaite même qu'elle croisse strictement dans le cas où on ne part pas d'une situation d'équilibre thermodynamique, faute de quoi on ne peut s'attendre à ce que le terme de collision décrive un retour du système à l'équilibre). Ceci s'exprime de la façon suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(- \int f \text{Log} f d^3x d^3p \right) = - \int \text{Log} \left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]_{coll} d^3x d^3p \geq 0,$$

11. pour cela la forme de l'opérateur de Fokker-Planck est particulièrement bien adaptée

où le terme entre parenthèses au premier membre est l'entropie statistique du milieu. On vérifie à partir de cette expression que l'équation de Vlasov conserve l'entropie, ce qui montre bien la nécessité d'un terme de collision pour atteindre un équilibre.

2.4.3 Moments hydrodynamiques

A partir de la fonction de distribution à une particule f_α (pour une espèce α donnée), on remonte par intégrations successives sur la vitesse aux grandeurs macroscopiques, correspondant à la description hydrodynamique du plasma.

- la densité de particules de l'espèce α est donnée par :

$$n_\alpha(\vec{r}, t) = \int f_\alpha(\vec{r}, \vec{v}, t) d^3v, \quad (2.55)$$

- la vitesse moyenne associée à l'espèce α se calcule selon :

$$\vec{V}_\alpha(\vec{r}, t) = \frac{1}{n_\alpha} \int \vec{v} f_\alpha(\vec{r}, \vec{v}, t) d^3v, \quad (2.56)$$

- le moment suivant correspond au flux d'énergie ionique associé à l'espèce α :

$$\vec{Q}_\alpha(\vec{r}, t) = \frac{1}{2} m_\alpha \int v^2 \vec{v} f_\alpha(\vec{r}, \vec{v}, t) d^3v, \quad (2.57)$$

- enfin, le dernier moment que l'on emploie usuellement est le tenseur de pression, qui s'obtient par :

$$\overline{\overline{P}}_\alpha(\vec{r}, t) = m_\alpha \int (\vec{v} - \vec{V}_\alpha) \otimes (\vec{v} - \vec{V}_\alpha) f_\alpha(\vec{r}, \vec{v}, t) d^3v. \quad (2.58)$$

Si la fonction de distribution possède une symétrie sphérique en vitesse, alors le tenseur de pression s'écrit $\overline{\overline{P}}_\alpha = p_\alpha \overline{\overline{Id}}$ où $\overline{\overline{Id}}$ est l'identité dans \mathbb{R}^3 et p_α est la pression scalaire vérifiant :

$$p_\alpha = \frac{m_\alpha}{3} \int (\vec{v} - \vec{V}_\alpha)^2 f_\alpha(\vec{r}, \vec{v}) d^3v = n_\alpha T_\alpha,$$

où la température associée à l'espèce α T_α est ici exprimée en unités d'énergie. De façon générale, l'anisotropie du tenseur de pressions est par ailleurs liée à la viscosité η , définie par la relation de fermeture :

$$P_{ij} = p \delta_{ij} - \eta \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right),$$

avec la convention de sommation sur les indices répétés.

De même, le flux de chaleur est lié au gradient de température par l'intermédiaire de la conductivité. Ces relations de fermeture, traduisent le couplage multi-échelle entre le niveau hydrodynamique et l'effet des collisions microscopiques, modélisées au niveau cinétique.

2.4.4 Equations fluides

Les moments hydrodynamiques sont ainsi obtenus par intégration de la fonction de distribution par rapport à la vitesse. De façon similaire, les équations de conservation fluides découlent de l'intégration de l'équation cinétique (2.16) sur les vitesses :

- L'intégration de (2.16) par rapport à la vitesse fournit la conservation de la densité de particules (aussi appelée équation de continuité) :

$$\int \left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial f_\alpha}{\partial \vec{r}} + \frac{q_\alpha}{m_\alpha} \left(\vec{E} + \frac{\vec{v} \times \vec{B}}{c} \right) \cdot \frac{\partial f_\alpha}{\partial \vec{v}} \right) d^3v = \int \left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} \right)_{coll} d^3v. \quad (2.59)$$

Or, le troisième terme du membre de gauche de (2.59) ainsi que le membre droite de (2.59) s'annulent puisqu'ils sont tous deux de la forme (voir l'expression du terme d'accélération (2.9) et l'approximation (2.10)) :

$$\int \left[\frac{\partial}{\partial v_1} \cdot \int \vec{a}_1(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_n) f^{(N)} d\vec{x}_2 \dots d\vec{x}_N d\vec{v}_2 \dots d\vec{v}_N \right] d\vec{v}_1.$$

Ce terme s'annule, puisque $f^{(N)}(v_1 = \pm\infty) = 0$. Cela traduit en particulier le fait que les collisions affectent la vitesse des particules mais pas la densité locale. L'équation (2.59) se réécrit ainsi sous la forme :

$$\frac{\partial n_\alpha(\vec{x}, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \cdot n_\alpha(\vec{x}, t) \vec{V}_\alpha(\vec{x}, t) = 0. \quad (2.60)$$

- L'équation de conservation sur la quantité de mouvement s'obtient en multipliant l'équation cinétique (2.16) par l'impulsion $m_\alpha \vec{v}$ (pour l'espèce α considérée) et en intégrant sur les vitesses :

$$\int m_\alpha \vec{v} \left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial f_\alpha}{\partial \vec{r}} + \frac{q_\alpha}{m_\alpha} \left(\vec{E} + \frac{\vec{v} \times \vec{B}}{c} \right) \cdot \frac{\partial f_\alpha}{\partial \vec{v}} \right) d^3v = \int m_\alpha \vec{v} \left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} \right)_{coll} d^3v.$$

En utilisant l'équation de continuité (2.60), et en employant les différents moments hydrodynamiques précédemment définis, la conservation de l'impulsion peut se reformuler comme suit :

$$n_\alpha m_\alpha \frac{\partial(\vec{V}_\alpha)}{\partial t} + n_\alpha m_\alpha \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \cdot (\vec{V}_\alpha \otimes \vec{V}_\alpha) - n_\alpha q_\alpha \left\langle \vec{E} + \frac{\vec{V}_\alpha \times \vec{B}}{c} \right\rangle + \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \cdot \overline{\vec{P}_\alpha} = m_\alpha \int \vec{v} \left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} \right)_{coll} d\vec{v} \quad (2.61)$$

Le membre droite correspond à une force de friction entre des particules d'espèces différentes. Il s'annule pour des collisions entre particules identiques. On peut l'approcher au niveau macroscopique par une expression de la forme :

$$m_\alpha \int \vec{v} \left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} \right)_{coll} d\vec{v} \approx -n_\alpha m_\alpha \sum_{\beta \neq \alpha} (\vec{V}_\alpha - \vec{V}_\beta) \langle \nu_{\alpha\beta} \rangle,$$

où $\langle \nu_{\alpha\beta} \rangle$ correspond à une fréquence de collisions moyenne modélisant le transfert d'impulsion entre les espèces α et β . Ce terme définit également la force de friction

volumique s'exerçant sur une espèce α du fait des collisions avec les particules d'une autre espèce β :

$$\vec{R}_\alpha = \frac{m_\alpha}{n_\alpha} \sum_{\beta \neq \alpha} \int \vec{v} \frac{\partial f_\alpha}{\partial t} \Big]_{coll.\alpha\beta} d\vec{v}$$

- Enfin, le moment sur $\vec{v} \otimes \vec{v}$ fournit une équation tensorielle dont la trace traduit la conservation de l'énergie totale :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{n_\alpha m_\alpha V_\alpha^2}{2} + \frac{3n_\alpha T_\alpha}{2} \right) - n_\alpha \vec{F}_\alpha \cdot \vec{V}_\alpha + \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \cdot \vec{Q}_\alpha = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{n_\alpha m_\alpha V_\alpha^2}{2} \right]_{coll} \Big).$$

On obtient ainsi un système "non-fermé", impliquant dans chaque équation écrite pour un moment donné, un moment de l'ordre suivant. L'hydrodynamique classique est le modèle obtenu en ne conservant que les moment d'ordre 0 à 2. Une relation de fermeture appelée *équation d'état* est alors requise pour relier les moments d'ordre plus élevé (pression, température) aux moments d'ordre plus bas (densité, vitesse). On retrouve ici un problème semblable au calcul de la fonction de distribution à une particule à partir de la fonction de distribution à N particules $f^{(N)}$ vérifiant l'équation de Liouville. La description réduite sur la fonction de distribution à une particule implique la connaissance de la fonction de distribution à deux particules $f^{(2)}$, qui elle-même dépend de $f^{(3)}$... La hiérarchie obtenue est fermée en négligeant les corrélations d'ordre élevé et en traduisant l'effet des corrélations par un modèle de collisions.

3

Modèle hybride fluide-cinétique pour la Fusion par Confinement Inertiel

Sommaire

3.1	Principes de la Fusion par Confinement Inertiel	152
3.2	Pertinence de l'approche cinétique	154
3.3	Modélisation cinétique du combustible DT d'une cible FCI	155
3.4	Réduction du modèle cinétique par développement asymptotique . . .	157
3.4.1	Normalisation de la fonction de distribution électronique . . .	158
3.4.2	Renormalisation des termes de collision	159
3.4.3	Forme de la distribution électronique	159
3.4.4	Développements asymptotiques de potentiels de Rosenbluth ioniques	160
3.4.5	Collisions des électrons sur les ions	161
3.4.6	Collisions des ions sur les électrons	162
3.4.7	Equation électronique	163
3.4.8	Conductivité électronique	165
3.4.9	Equation du champ électrique	165
3.5	Choix d'un système d'unités réduites	166
3.6	Modèle complet adimensionné	166

Dans ce chapitre, on applique le modèle de Vlasov-Fokker-Planck développé dans le précédent chapitre au cas particulier des plasmas rencontrés en Fusion par Confinement Inertiel (FCI). Après avoir rappelé les principes de la FCI, on montre la pertinence de l'approche cinétique, en particulier pour décrire finement la phase de propagation du choc dans la zone centrale des capsules de FCI, sous la forme d'un point chaud caractérisé par des effets *non-collisionnels* pouvant jouer un rôle important. La problématique liée au contraste des échelles de temps électronique/ionique à traiter est ensuite exposée. On montre alors comment réduire le modèle complet cinétique à un modèle hybride fluide/cinétique, où une modélisation fluide des électrons est couplée à une approche cinétique pour les espèces ioniques. Ceci permet alors d'envisager une résolution numérique

applicable à des configurations réalistes de cibles FCI, sans engendrer de temps CPU prohibitifs.

3.1 Principes de la Fusion par Confinement Inertiel

Les installations laser NIF-*National Ignition Facility*¹² ou *Laser MegaJoule*¹³ opérationnelles depuis peu, sont conçues pour permettre d'atteindre des conditions thermodynamiques propres à déclencher des réactions de fusion au sein d'une cible sphérique formée d'un mélange de deuterium-tritium (DT).

En FCI, la cible de DT est comprimée par une pression engendrée par l'ablation d'une coquille de matériau plastique (appelé ablateur) englobant la coquille de combustible (initialement dans un état cryogénique). L'ablation est provoquée par rayonnement, qui provient :

- soit directement du laser incident, on parle alors d'attaque directe (voir par exemple [61]),
- soit d'une cavité de conversion, dont les parois opaques attaquées par le laser (voir Fig. 3.1) émettent du rayonnement X. On parle alors d'attaque indirecte (voir par exemple [58]).

Dans le cas du laser NIF, le schéma d'attaque est indirect. L'énergie du laser ~ 1.8 MJ interagit avec les parois de la cavité et engendre une température de cavité de l'ordre 300 eV (voir la référence [32]).

Lorsque les parois de la cavité interagissent avec le flux laser, une onde thermique instationnaire, appelée aussi onde Marshak [63] se développe. Cette structure particulière est caractérisée par un front en température très raide se propageant dans le matériau opaque. La raideur du front est étroitement liée à la dépendance non-linéaire de l'opacité du milieu par rapport à la température. Pour des flux incidents très intenses, l'onde thermique se propage de manière supersonique, dans une hydrodynamique figée : en particulier, la densité de la paroi reste constante. Après quelques instants, la paroi finit par se détendre vers l'intérieur de la cavité, et une onde de raréfaction se propage dans la paroi. L'onde de raréfaction finit par rattraper le front thermique et une onde thermique d'ablation s'établit. La pression au front d'ablation tend à accélérer la matière devant le front, ce qui peut conduire à une onde de choc se détachant à l'avant du front thermique. Pour une étude analytique récente des fronts de Marshak en régime supersonique et subsonique, nous renvoyons aux références [37, 30].

En outre, une compression du DT d'un facteur ~ 1000 est requise pour déclencher les réactions de fusion. L'idée d'utiliser l'énergie d'un laser pour atteindre une telle compression a été publiée pour la première fois par Nuckolls *et al.* dans la référence [68]. Dans cette publication, qui marque le début de la recherche ouverte sur la FCI, les auteurs dévoilent les principes de base de la FCI en décrivant l'implosion de cibles de DT cryogénique pilotée par énergie laser. Ils décrivent également comment comprimer le combustible de la manière la plus isentropique possible en ajustant la chronométrie des impulsions lasers. Une

12. lasers.llnl.gov

13. www-lmj.cea.fr

approche analytique clarifiant la relation entre la compression isentropique et la pression à appliquer à la cible est présentée dans [42].

Pour atteindre les taux de compression voulus, l'implosion de combustible doit s'effectuer avec une forte vitesse, tout en minimisant l'entropie. Une configuration de cible de type sphère creuse (voir Fig. 3.2) caractérisée par une épaisseur de coquille beaucoup plus faible que son rayon est alors plus favorable qu'une sphère pleine. Le combustible peut en effet être accéléré sur une distance plus importante. La pression qu'il est nécessaire d'appliquer à la cible pour atteindre la vitesse d'implosion requise est aussi moins élevée dans le cas d'un combustible en coquille (voir [43]). Les caractéristiques du processus d'implosion (vitesse d'implosion, efficacité hydrodynamique) peuvent être obtenues à partir du modèle dit de la "fusée" (rocket model) exposé dans [67]. Ce modèle est basé sur les équations de conservation de la quantité de mouvement d'un système à masse variable. Le flux d'énergie intense éclairant la capsule provoque en effet l'éjection d'une certaine masse d'ablateur. Par conservation de la quantité de mouvement, cette éjection de matière provoque l'implosion de la capsule. La pression d'ablation est alors le produit du taux de masse ablatée et de la vitesse d'éjection.

Un autre paramètre clé dans l'implosion est la pression centrale à la stagnation du combustible. Cette grandeur est en effet liée à l'énergie à investir dans la capsule pour obtenir l'ignition. La pression à la stagnation peut s'exprimer à partir des paramètres d'implosion (pression d'ablation, vitesse d'implosion et paramètre d'isentropie caractérisant la propagation des chocs). Les lois d'échelle correspondantes sont par exemple établies dans les références [41, 38, 6, 9].

La Fig. 3.2 rappelle les différentes zones d'interaction où des effets cinétiques fins sont susceptibles de se développer et pour lesquels, il est nécessaire de développer une modélisation adaptée, au delà de l'approximation fluide (voir [77]).

En particulier, au voisinage de l'instant d'ignition, les cibles de FCI, comprimées à des densités de l'ordre de quelques centaines de g.cm^{-3} sont sous la forme d'un point chaud central de DT, caractérisé par une température élevée $T \approx 7 - 10 \text{ keV}$, entourée

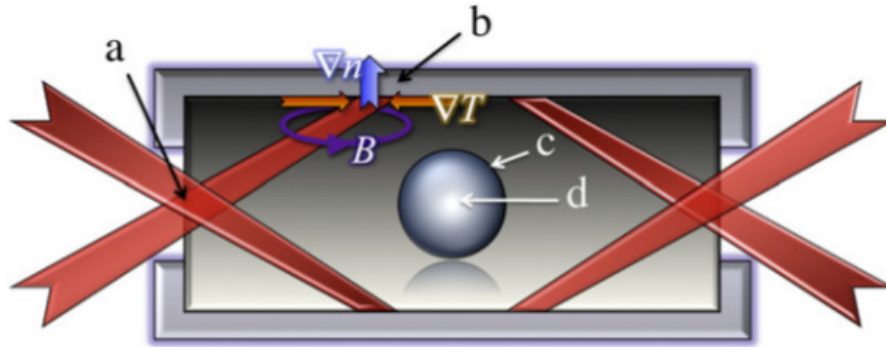


FIGURE 3.1 – Importance des effets cinétiques dans le schéma d'attaque indirect.
(a) *Instabilités au niveau du trou d'entrée laser.* (b) *Chauffage laser non-local et champs magnétiques au voisinage des parois de la cavité.* (c) *Ablation de la surface externe de la capsule.* (d) *Préchauffage, propagation du choc dans la capsule.*

d'une coquille de combustible dense et plus froide ($T \approx 0.7$ keV) regroupant l'essentiel de la masse du combustible. C'est dans la zone du point chaud que démarrent les réactions de fusion. La densité de cette zone chaude et centrale ($\rho \sim 50 \text{ g.cm}^{-3}$) est telle que le libre parcours moyen des particules α est de l'ordre du rayon du point chaud $R \sim 30 \mu\text{m}$. Le point chaud monte alors en température, et sert en quelque sorte d'étincelle pour déclencher la propagation du front de combustion au sein de la coquille de combustible dense.

3.2 Pertinence de l'approche cinétique

La capsule de DT, comprimée par la pression d'ablation, devient très dense et très chaude. Dans un tel milieu plasma, les collisions, c'est à dire les corrélations entre les particules chargées, jouent un rôle important. Dans les zones très collisionnelles (comme dans la coquille de combustible dense), les collisions ramènent les fonctions de distribution à l'équilibre, vers les distributions de Maxwell-Boltzmann (ou Fermi-Dirac si l'on prend en compte la dégénérescence électronique). En revanche, dans les zones moins denses et plus chaudes, comme dans la région centrale du point chaud, les fonctions de distribution peuvent dévier de l'équilibre. Ceci est particulièrement vrai au voisinage des fronts de choc qui se propagent dans le point chaud. L'approche fluide, basée sur la description du milieu à partir des moyennes hydrodynamiques (densité, vitesse, température), est applicable pour traiter les régions fortement collisionnelles. En revanche, pour modéliser rigoureusement la phase de convergence du choc dans le point chaud central, il est a priori nécessaire d'aborder le problème au niveau cinétique. Au voisinage de la convergence du choc dans la zone centrale de la capsule, le libre parcours moyen collisionnel des ions

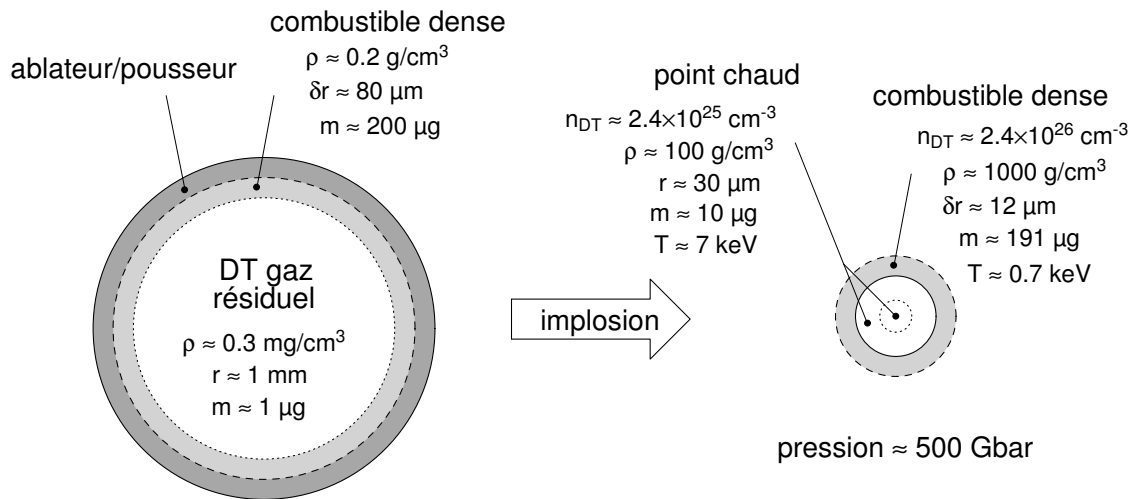


FIGURE 3.2 – Configuration et ordres de grandeur des quantités hydrodynamiques pour l'implosion d'une cible de type NIF-mégajoule.

En pointillé, l'interface entre le DT gazeux initialement présent dans la cible et le DT solide. En tireté, l'interface combustible/pousseur.

D,T est en effet comparable à la taille du point chaud (voir en particulier le chapitre 7 pour des valeurs numériques précises et représentatives de configurations réalistes). Les effets microscopiques sont alors susceptibles d'avoir des répercussions macroscopiques sur la mise en condition du point chaud.

Dans une modélisation cinétique appliquée au combustible DT d'une capsule FCI, chaque espèce de particules chargées (ions thermiques D,T, électrons) est modélisée par une fonction de distribution dont l'évolution est régie par l'équation de Vlasov- Fokker-Planck.

Le problème cinétique complet est alors caractérisé par plusieurs échelles de temps et d'espace :

- Une échelle de temps courte est associée aux électrons, qui du fait de leur faible masse, réagissent très rapidement.
- Une échelle de temps longue correspondant à la dynamique des ions.

Le contraste sur les échelles temporelles se retrouve au niveau des longueurs caractéristiques : les électrons sont en effet caractérisés par un libre parcours de collision très petit devant celui des ions et devant l'échelle de longueur caractéristique du problème ($\sim 100 \mu\text{m}$).

Dans une modélisation dépendant du temps, il faudra donc gérer ce contraste d'échelles. En pratique, on s'intéresse à des temps qui correspondent à une échelle dite "hydrodynamique", proche de l'échelle de temps longue correspondant à la dynamique des espèces ioniques. Nous montrons alors, qu'à cette échelle d'observation, le modèle complet cinétique se réduit à un modèle *hybride* où les électrons sont modélisés par un modèle de type fluide, couplé à un ensemble d'équations de Vlasov-Fokker-Planck régissant les fonctions de distribution de chaque espèce ionique.

3.3 Modélisation cinétique du combustible DT d'une cible FCI

On décrit l'évolution des ions repérés par un indice $i = D, T$ et des électrons de la capsule au moyen des équations de Vlasov-Fokker-Planck que l'on a introduites au chapitre précédent. On écrit ainsi le système d'équations couplant les fonction de distribution ioniques $f_i(r, \vec{v}, t)$ à la fonction de distribution électronique $f_e(r, \vec{v}, t)$:

$$\begin{cases} \frac{\partial f_i}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial f_i}{\partial \vec{r}} + \frac{Z_i e \vec{\mathcal{E}}}{m_i} \cdot \frac{\partial f_i}{\partial \vec{v}} = \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial f_i}{\partial t} \right)_{ij} + \left(\frac{\partial f_i}{\partial t} \right)_{ie} \\ \frac{\partial f_e}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial f_e}{\partial \vec{r}} - \frac{e \vec{\mathcal{E}}}{m_e} \cdot \frac{\partial f_e}{\partial \vec{v}} = \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial f_e}{\partial t} \right)_{ej} + \left(\frac{\partial f_e}{\partial t} \right)_{ee} \end{cases} \quad (3.1)$$

Les termes de collisions prennent la forme intégrale suivante (développée en coordonnées cartésiennes) :

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f_i}{\partial t} \right)_{ij} &= \Gamma_{ij} \frac{\partial}{\partial v_\alpha} \left[\frac{m_i}{m_j} f_i(\vec{v}) \int \frac{v_\alpha - v'_\alpha}{|\vec{v} - \vec{v}'|^3} f_j(\vec{v}') d^3 v' \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \frac{\partial f_i}{\partial v_\beta}(\vec{v}) \int \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{(v_\alpha - v'_\alpha)(v_\beta - v'_\beta)}{|\vec{v} - \vec{v}'|^2} \right) \frac{f_j(\vec{v}')}{|\vec{v} - \vec{v}'|} d^3 v' \right], \end{aligned} \quad (3.2)$$

où l'on utilise la convention d'Einstein pour la sommation sur les indices répétés α et β . Le symbole de Kronecker $\delta_{\alpha\beta}$ est également employé pour expliciter la matrice identité.

On pose :

$$\Gamma_{ij} = \frac{4\pi e^4 Z_i^2 Z_j^2}{m_i^2} \text{Log} \Lambda_{ij}.$$

On rappelle la définition du logarithme Coulombien, tenant compte des effets quantiques :

$$\text{Log} \Lambda_{ij} = \text{Log} \frac{\lambda_D}{\max(\lambda_{bar}, \rho_\perp)}, \quad (3.3)$$

où λ_D est la longueur de Debye :

$$\lambda_D = \left(\frac{4\pi n_e e^2}{T_e} + \sum_{j=1}^n \frac{4\pi n_j Z_j^2 e^2}{T_j} \right)^{-1/2},$$

et ρ_\perp est le paramètre d'impact caractéristique intervenant dans la déflexion Coulombienne, défini par :

$$\rho_\perp = \frac{Z_a Z_b e^2}{m_{ij} u^2}.$$

Dans l'équation précédente, $m_{ij} = \frac{m_i m_j}{m_i + m_j}$ est la masse moyenne et u la vitesse caractéristique représentant la vitesse moyenne initiale dans une collision Coulombienne $i - j$, définie par :

$$u = \sqrt{3} \left(\frac{k_b T_i}{m_i} + \frac{k_b T_j}{m_j} \right)^{1/2}.$$

λ_{bar} est la longueur d'onde de Broglie réduite pour la particule incidente :

$$\lambda_{bar} = \frac{\hbar}{m_{ij} u}.$$

Le terme de collision peut également s'écrire au moyen des potentiels de Rosenbluth \mathcal{S} et \mathcal{T} qui sont définis par

$$\mathcal{S}_j = -\frac{1}{4\pi} \int \frac{f_j(\vec{v}')}{|\vec{v} - \vec{v}'|} d^3 v' \quad \text{et} \quad \mathcal{T}_j = -\frac{1}{8\pi} \int |\vec{v} - \vec{v}'| f_j(\vec{v}') d^3 v'.$$

Ces potentiels sont tels que :

$$\left(\frac{\partial f_i}{\partial t}\right)_{ij} = \frac{16\pi^2 Z_i^2 Z_j^2 e^4}{m_i^2} \text{Log} \Lambda_{ij} \frac{\partial}{\partial v_\alpha} \left[\frac{m_i}{m_j} \frac{\partial \mathcal{S}_j}{\partial v_\alpha} f_i - \frac{\partial^2 \mathcal{T}_j}{\partial v_\alpha \partial v_\beta} \frac{\partial f_i}{\partial v_\beta} \right]. \quad (3.4)$$

Les potentiels de Rosenbluth vérifient les équations de Poisson dans l'espace des vitesses :

$$\Delta_v \mathcal{S}_j = f_j \quad \Delta_v \mathcal{T}_j = \mathcal{S}_j.$$

3.4 Réduction du modèle cinétique par développement asymptotique

Un modèle complètement cinétique ionique-électronique est a priori trop complexe pour s'appliquer au fonctionnement de configurations FCI réelles, que l'on cherche à observer sur des échelles de temps hydrodynamiques (\sim ns) et des longueurs correspondant au rayon du combustible DT ($\sim 100\mu\text{m}$). En particulier, l'échelle de temps caractéristique associée aux électrons conduirait à des temps de calcul prohibitifs. Néanmoins, il est possible d'exploiter le contraste des échelles caractéristiques associées aux ions et aux électrons, afin de réduire la modélisation tout cinétique à une approche hybride où les électrons sont modélisés suivant une approche réduite fluide couplée à un modèle cinétique pour les ions. Cette modélisation est pertinente pour la simulation des plasmas de fusion FCI observés sur des échelles de temps et de longueur correspondant aux échelles ioniques.

Du point de vue des techniques multi-échelles, la méthode suivie pour établir le modèle hybride est quelque peu semblable au développement asymptotique exposé dans la première partie sur le problème de diffusion en milieux fissurés. Ici, l'aspect multi-échelle a trait à l'existence de deux échelles de vitesse caractéristiques :

- la grande échelle correspond à l'échelle de vitesse électronique $v_{th}^e = \sqrt{\frac{T_e}{m_e}}$,
- la petite échelle est associée à l'échelle de vitesse des ions $v_{th}^i = \sqrt{\frac{T_i}{m_i}}$.

Les deux échelles de vitesse sont dans un rapport $\frac{v_{th}^i}{v_{th}^e} \sim \sqrt{\frac{m_e}{m_i}} = \varepsilon$ (voir Fig. 3.3). L'idée est alors de renormaliser la fonction de distribution électronique de manière à ce que sa largeur soit comparable à la taille du support en vitesse de la fonction de distribution ionique. On en déduit alors un développement en puissance de ε des termes de ralentissement modélisant respectivement l'effet des collisions des ions sur les électrons, des électrons sur les ions, et des électrons sur les électrons.

On montre en particulier que le terme de collision électron-électron varie en $\mathcal{O}(\frac{1}{\varepsilon})$, de sorte qu'à l'échelle de temps qui nous intéresse, correspondant à l'échelle de temps des collisions ion-ion, la fonction distribution électronique peut être considérée comme une fonction Maxwellienne à des corrections d'ordre ε près. Ceci permet alors de simplifier avantageusement l'expression des termes de collision ion-électron et électron-ion.

Nous exposons dans la suite le détail de ces différentes étapes, en renvoyant à [24] pour une justification détaillée dans un cadre mathématique plus rigoureux.

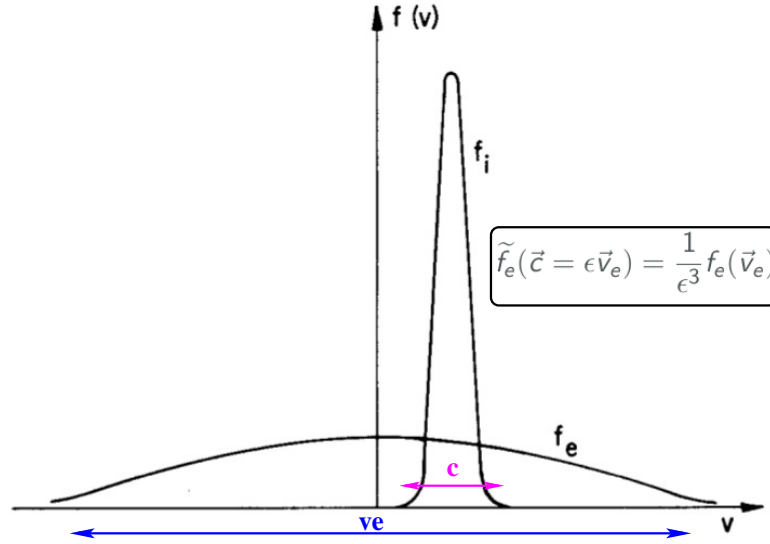


FIGURE 3.3 – Couplage multi-échelle entre les électrons et les ions thermiques
 La fonction de distribution électronique est caractérisée par une largeur $v_{th}^e \sim \sqrt{T/m_e}$ beaucoup plus grande que la largeur $v_{th}^i \sim \sqrt{T/m_i}$ des fonctions distribution ioniques.
 On effectue alors une mise à l'échelle des fonctions de distribution de manière à ramener leur support sur l'échelle de vitesse relative aux ions thermiques.

3.4.1 Normalisation de la fonction de distribution électronique

On effectue une mise à l'échelle du modèle électronique en prenant comme échelle de référence les grandeurs associées aux ions :

- l'échelle de vitesse de référence est la vitesse thermique ionique v_{th}^i ,
- l'échelle de temps correspond au temps de collision ion-ion,
- l'échelle de longueur coïncide avec le libre parcours de collision moyen ion-ion.

La renormalisation de la fonction de distribution électronique par rapport à la vitesse s'effectue en définissant :

$$\tilde{f}_e(\vec{c} = \epsilon \vec{v}) = \frac{1}{\epsilon^3} f_e(\vec{v}). \quad (3.5)$$

\tilde{f}_e prend alors des valeurs numériques du même ordre de grandeur que celles des fonctions de distribution ioniques, et la taille de son support en vitesse (en tant que fonction de la vitesse \vec{c}) est comparable à celle des distributions ioniques.

On applique alors une renormalisation cohérente aux potentiels de Rosenbluth électroniques. On pose ainsi :

$$\tilde{\mathcal{S}}_e(\vec{c} = \epsilon \vec{v}) = \frac{1}{\epsilon} \mathcal{S}_e(\vec{v}) \quad \tilde{\mathcal{T}}_e(\vec{c} = \epsilon \vec{v}) = \epsilon \mathcal{T}_e(\vec{v})$$

de sorte que :

$$\Delta_c \tilde{\mathcal{S}}_e = \tilde{f}_e \quad \Delta_c \tilde{\mathcal{T}}_e = \tilde{\mathcal{S}}_e.$$

3.4.2 Renormalisation des termes de collision

La mise à l'échelle de la fonction de distribution se traduit en un développement en puissance de ε des différents termes de collisions. Plus précisément, en utilisant les relations :

$$\frac{\partial \mathcal{S}_e}{\partial v}(\vec{v}) = \varepsilon^2 \frac{\partial \tilde{\mathcal{S}}_e}{\partial \vec{c}}(\vec{c} = \varepsilon v) \quad \frac{\partial^2 \mathcal{T}_e}{\partial v_\alpha \partial v_\beta}(\vec{v}) = \varepsilon \frac{\partial^2 \tilde{\mathcal{T}}_e}{\partial c_\alpha \partial c_\beta}(\vec{c} = \varepsilon v)$$

on peut écrire les termes de collision des ions sur les électrons sous la forme :

$$\left(\frac{\partial f_i}{\partial t} \right)_{ie} = \frac{16\pi^2 Z_i^2 e^4}{m_i^2} \text{Log} \Lambda_{ie} \frac{\partial}{\partial v_\alpha} \left[A_i \frac{\partial \tilde{\mathcal{S}}_e}{\partial c_\alpha}(\varepsilon \vec{v}) f_i(\vec{v}) - \varepsilon \frac{\partial^2 \tilde{\mathcal{T}}_e}{\partial c_\alpha \partial c_\beta}(\varepsilon \vec{v}) \frac{\partial f_i}{\partial v_\beta}(\vec{v}) \right]. \quad (3.6)$$

Pour le terme de collisions électrons-ions, en remarquant que $\left(\frac{\partial f_e}{\partial t} \right)_{ie} = \varepsilon^3 \left(\frac{\partial \tilde{f}_e}{\partial t} \right)_{ei}$, et en utilisant la relation $\frac{\partial f_e}{\partial v}(\vec{v}) = \varepsilon^4 \frac{\partial \tilde{f}_e}{\partial \vec{c}}(\vec{c} = \varepsilon \vec{v})$, on a :

$$\left(\frac{\partial \tilde{f}_e}{\partial t} \right)_{ei} = \frac{16\pi^2 Z_i^2 e^4}{\varepsilon m_p^2} \text{Log} \Lambda_{ei} \frac{\partial}{\partial c_\alpha} \left[\frac{1}{A_i} \frac{\partial \mathcal{S}_i}{\partial v_\alpha} \left(\frac{\vec{c}}{\varepsilon} \right) \tilde{f}_e(\vec{c}) - \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial^2 \mathcal{T}_i}{\partial v_\alpha \partial v_\beta} \left(\frac{\vec{c}}{\varepsilon} \right) \frac{\partial \tilde{f}_e}{\partial c_\beta}(\vec{c}) \right]. \quad (3.7)$$

Enfin, la renormalisation du terme de collision électron-électron donne :

$$\left(\frac{\partial \tilde{f}_e}{\partial t} \right)_{ee} = \frac{16\pi^2 e^4}{\varepsilon m_p^2} \text{Log} \Lambda_{ee} \frac{\partial}{\partial c_\alpha} \left[\frac{\partial \tilde{\mathcal{S}}_e}{\partial c_\alpha} \left(\frac{\vec{c}}{\varepsilon} \right) \tilde{f}_e(\vec{c}) - \frac{\partial^2 \tilde{\mathcal{T}}_e}{\partial c_\alpha \partial c_\beta}(\vec{c}) \frac{\partial \tilde{f}_e}{\partial c_\beta}(\vec{c}) \right]. \quad (3.8)$$

3.4.3 Forme de la distribution électronique

On remarque que les termes de collision renormalisés des électrons sur les électrons et des électrons sur les ions respectivement donnés par (3.8) et (3.7), sont d'ordre $1/\varepsilon$. Cela signifie que, sur l'échelle de temps considérée qui est le temps caractéristique d'une collision ion-ion, la distribution électronique $\tilde{f}_e(\vec{c})$ a tendance à être Maxwellienne à des corrections d'ordre ε près. On peut ainsi écrire :

$$\tilde{f}_e(\vec{c}) = \tilde{f}_{e0}(\vec{c}) + \varepsilon \tilde{f}_{e1}(\vec{c}), \quad (3.9)$$

où

$$\tilde{f}_{e0}(\vec{c}) = \frac{n_e}{(2\pi k_b T_e / m_p)^{3/2}} \exp - \frac{m_p (\vec{c} - \varepsilon \vec{u}_e)^2}{2k_b T_e},$$

est la fonction de distribution Maxwellienne électronique renormalisée selon (3.5). La correction $\varepsilon \tilde{f}_{e1}(\vec{c})$ contient tout ce qui est d'ordre supérieur ou égal à un en ε .

Compte tenu de la forme supposée pour la distribution électronique, les potentiels de Rosenbluth s'expriment suivant :

$$\widetilde{\mathcal{S}}_e(\vec{c}) = \widetilde{\mathcal{S}}_{e0}(\vec{c}) + \varepsilon \widetilde{\mathcal{S}}_{e1}(\vec{c}), \quad (3.10)$$

où la partie principale est connue explicitement en fonction de $w = \left(\frac{m_p}{2k_b T_e} \right)^{1/2} |\vec{c} - \varepsilon \vec{u}_e|$:

$$\widetilde{\mathcal{S}}_{e0}(\vec{c}) = -\frac{n_e}{4\pi} \left(\frac{m_p}{2k_b T_e} \right)^{1/2} \frac{\text{erf}(w)}{w}.$$

De même, on peut décomposer le second potentiel suivant :

$$\widetilde{\mathcal{T}}_e(\vec{c}) = \widetilde{\mathcal{T}}_{e0}(\vec{c}) + \varepsilon \widetilde{\mathcal{T}}_{e1}(\vec{c}), \quad (3.11)$$

avec comme partie principale :

$$\widetilde{\mathcal{T}}_{e0}(\vec{c}) = -\frac{n_e}{8\pi} \left(\left(w + \frac{1}{2w} \right) \text{erf}(w) + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp -w^2 \right).$$

3.4.4 Développements asymptotiques de potentiels de Rosenbluth ioniques

Pour des valeurs de \vec{c} d'ordre ε^0 , correspondant à des valeurs de \vec{v} d'ordre $1/\varepsilon$, on peut développer les potentiels de Rosenbluth associés aux ions en puissance de ε . Commençons par les composantes du gradient en vitesse associé au premier potentiel $\widetilde{\mathcal{S}}_i$:

$$\frac{\partial \mathcal{S}_i}{\partial v_\alpha} = \frac{1}{4\pi} \int \frac{v_\alpha - v'_\alpha}{\|\vec{v} - \vec{v}'\|^3} f_i(\vec{v}') d^3 v', \alpha = \{1, 2, 3\},$$

que l'on évalue en $\vec{v} = \frac{\vec{c}}{\varepsilon}$:

$$\frac{\partial \mathcal{S}_i}{\partial v_\alpha} \left(\frac{\vec{c}}{\varepsilon} \right) = \varepsilon^2 \frac{c_\alpha}{4\pi c^3} n_i + \mathcal{O}(\varepsilon^3).$$

Ce développement limité traduit l'idée qu'à l'échelle de la vitesse thermique électronique, la distribution ionique s'étend sur un support très localisé en vitesse.

De même, les composantes de la Hessienne du second potentiel $\widetilde{\mathcal{T}}_i$:

$$\frac{\partial^2 \mathcal{T}_i}{\partial v_\alpha \partial v_\beta} = -\frac{1}{8\pi} \int \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{(v_\alpha - v'_\alpha)(v_\beta - v'_\beta)}{\|\vec{v} - \vec{v}'\|^2} \right) \frac{f_i(\vec{v}')}{\|\vec{v} - \vec{v}'\|} d^3 v',$$

s'expriment au point $\vec{v} = \frac{\vec{c}}{\varepsilon}$ suivant :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial^2 \mathcal{T}_i}{\partial v_\alpha \partial v_\beta} \left(\frac{\vec{c}}{\varepsilon} \right) &= -\frac{1}{8\pi} \int \left[\frac{\varepsilon}{c} \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{c_\alpha c_\beta}{c^2} \right) \right] f_i(\vec{v}') d^3 v' \\
 &- \frac{1}{8\pi} \int \left[\frac{\varepsilon^2}{c^2} \left\{ \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{3c_\alpha c_\beta}{c^2} \right) \frac{\vec{c} \cdot \vec{v}'}{c} + \frac{c_\alpha v'_\beta + c_\beta v'_\alpha}{c} \right\} \right] f_i(\vec{v}') d^3 v' \\
 &- \frac{1}{8\pi} \int \left[\frac{\varepsilon^3}{c^3} \left\{ \frac{1}{2} \delta_{\alpha\beta} \left(\frac{3(\vec{c} \cdot \vec{v}')^2}{c^2} - v'^2 \right) - \frac{3c_\alpha c_\beta}{2c^2} \left(\frac{5(\vec{c} \cdot \vec{v}')^2}{c^2} - v'^2 \right) \right. \right. \\
 &+ \left. \left. 3 \frac{\vec{c} \cdot \vec{v}'}{c} \frac{c_\alpha v'_\beta + c_\beta v'_\alpha}{c} - v'_\alpha v'_\beta \right\} \right] f_i(\vec{v}') d^3 v' \\
 &+ \mathcal{O}(\varepsilon^4).
 \end{aligned}$$

Ce développement s'exprime aussi à l'aide des moments hydrodynamiques associés à la fonction de distribution ionique :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial^2 \mathcal{T}_i}{\partial v_\alpha \partial v_\beta} \left(\frac{\vec{c}}{\varepsilon} \right) &= \frac{-\varepsilon n_i}{8\pi c} \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{c_\alpha c_\beta}{c^2} \right) \\
 &- \frac{\varepsilon^2 n_i}{8\pi c^2} \left\{ \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{3c_\alpha c_\beta}{c^2} \right) \frac{\vec{c} \cdot \vec{V}_i}{c} + \frac{c_\alpha V_{i\beta} + c_\beta V_{i\alpha}}{c} \right\} \\
 &- \frac{\varepsilon^3 n_i}{8\pi c^3} \left\{ \frac{3}{2c^2} \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{5c_\alpha c_\beta}{c^2} \right) (c_\gamma c_\delta \frac{P_{\gamma\delta}}{m_i} + n_i (\vec{c} \cdot \vec{V}_i)^2) - \frac{n_i}{2} \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{3c_\alpha c_\beta}{c^2} \right) \left(\frac{3T_i}{m_i} + V_i^2 \right) \right. \\
 &+ \left. \frac{3}{c^2} (c_\gamma c_\alpha \frac{P_{\beta\gamma}}{m_i} + c_\gamma c_\beta \frac{P_{\alpha\gamma}}{m_i} + n_i \vec{c} \cdot \vec{V}_i (c_\alpha V_{i\beta} + c_\beta V_{i\alpha}) - \frac{P_{\alpha\beta}}{m_i} - n_i V_{i\alpha} V_{i\beta}) \right\}.
 \end{aligned}$$

3.4.5 Collisions des électrons sur les ions

On étudie le terme de collisions des électrons sur les ions. Le terme dominant dans l'expression de $\left(\frac{\partial \tilde{f}_e}{\partial t} \right)_{ei}$ (Eq.(3.7)) est en $\mathcal{O}(\frac{1}{\varepsilon})$ et disparaît si \tilde{f}_e est isotrope à l'ordre ε^0 . Compte tenu de la forme retenue (3.9) pour \tilde{f}_e , \tilde{f}_e est bien isotrope en \vec{c} à l'ordre ε^0 . Le terme dominant de $\left(\frac{\partial \tilde{f}_e}{\partial t} \right)_{ei}$ est alors d'ordre ε^0 et contient un terme proportionnel à la différence des vitesses fluides électronique et ionique (correspondant à la friction électron-ion). Il contient également un terme supplémentaire proportionnel à \tilde{f}_{e1} , correspondant à la force thermique liée au flux de chaleur électronique. Plus précisément, le terme de collision des électrons sur les ions s'écrit :

$$\left(\frac{\partial \tilde{f}_e}{\partial t} \right)_{ei0} = \frac{2\pi^2 Z_i^2 e^4 n_i}{m_p T_e} \text{Log} \Lambda_{ei} \frac{\partial}{\partial c_\alpha} \left[\frac{1}{c} \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{c_\alpha c_\beta}{c^2} \right) \left((V_{e\beta} - V_{i\beta}) \tilde{f}_{e0} + \frac{T_e}{m_p} \frac{\partial \tilde{f}_{e1}}{\partial c_\beta} \right) \right]. \quad (3.12)$$

Il s'agit de la divergence en vitesse d'un produit matrice-vecteur et on utilise la convention de sommation sur les indices répétés.

3.4.6 Collisions des ions sur les électrons

A partir de la forme retenue pour les potentiels de Rosenbluth électroniques, on peut calculer les dérivées des potentiels nécessaires au calcul des termes de collision des ions sur les électrons $\left(\frac{\partial f_i}{\partial t}\right)_{ie}$ intervenant dans l'équation d'évolution de la fonction de distribution des ions.

Le gradient du potentiel $\widetilde{\mathcal{S}}_e$ s'écrit :

$$\frac{\partial \widetilde{\mathcal{S}}_e}{\partial c_\alpha}(\vec{c}) = \frac{\partial \widetilde{\mathcal{S}}_{e0}}{\partial c_\alpha}(\vec{c}) + \varepsilon \frac{\partial \widetilde{\mathcal{S}}_{e1}}{\partial c_\alpha}(\vec{c}), \quad (3.13)$$

avec

$$\frac{\partial \widetilde{\mathcal{S}}_{e0}}{\partial c_\alpha}(\vec{c}) = \frac{n_e}{4\pi} \left(\frac{m_p}{2k_b T_e} \right)^{1/2} \frac{c_\alpha - \varepsilon u_{e\alpha}}{w} \left(\frac{\text{erf}(w)}{w} - \frac{2}{\sqrt{\pi}w} \exp -w^2 \right).$$

La Hessienne du potentiel $\widetilde{\mathcal{T}}_e$ s'écrit selon :

$$\frac{\partial^2 \widetilde{\mathcal{T}}_e}{\partial c_\alpha \partial c_\beta}(\vec{c}) = \frac{\partial^2 \widetilde{\mathcal{T}}_{e0}}{\partial c_\alpha \partial c_\beta}(\vec{c}) + \varepsilon \frac{\partial^2 \widetilde{\mathcal{T}}_{e1}}{\partial c_\alpha \partial c_\beta}(\vec{c}), \quad (3.14)$$

avec

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \widetilde{\mathcal{T}}_{e0}}{\partial c_\alpha \partial c_\beta}(\vec{c}) = & -\frac{n_e}{8\pi} \left[\delta_{\alpha\beta} \left(\left(\frac{1}{w} - \frac{1}{2w^3} \right) \text{erf}(w) + \frac{\exp -w^2}{\sqrt{\pi}w^2} \right) \right. \\ & \left. - \frac{(c_\alpha - \varepsilon u_{e\alpha})(c_\beta - \varepsilon u_{e\beta})}{|\vec{c} - \varepsilon \vec{u}_e|^2} \left(\left(\frac{1}{w} - \frac{3}{2w^3} \right) \text{erf}(w) + \frac{3 \exp -w^2}{\sqrt{\pi}w^2} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.15)$$

En tronquant ces expressions à l'ordre un en ε , on a :

$$\frac{\partial \widetilde{\mathcal{S}}_e}{\partial c_\alpha}(\vec{c} = \varepsilon \vec{v}) = \frac{n_e}{3} \left(\frac{m_p}{2\pi k_b T_e} \right)^{3/2} \varepsilon (v_\alpha - u_{e\alpha}) + \varepsilon \frac{\partial \widetilde{\mathcal{S}}_{e1}}{\partial c_\alpha}(\varepsilon \vec{v}),$$

et

$$\varepsilon \frac{\partial^2 \widetilde{\mathcal{T}}_e}{\partial c_\alpha \partial c_\beta}(\vec{c} = \varepsilon \vec{v}) = -\varepsilon \frac{n_e}{6\pi^{3/2}} \left(\frac{m_p}{2k_b T_e} \right)^{1/2} \delta_{\alpha\beta}.$$

Finalement, on peut injecter ces deux dernières relations pour obtenir la forme suivante du terme de collision des ions sur les électrons :

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f_i}{\partial t} \right)_{ie} = & \frac{16\pi^2 Z_i^2 e^4}{m_i^2} \text{Log} \Lambda_{ie} \frac{n_e m_e^{1/2} m_i}{3} \left(\frac{1}{2\pi k_b T_e} \right)^{3/2} \frac{\partial}{\partial v_\alpha} \left[(v_\alpha - u_{e\alpha}) f_i(\vec{v}) + \frac{k_b T_e}{m_i} \frac{\partial f_i}{\partial v_\alpha}(\vec{v}) \right. \\ & \left. + A_i \varepsilon \frac{\partial}{\partial v} \cdot \left(\frac{\partial \widetilde{\mathcal{S}}_{e1}}{\partial \vec{c}}(\varepsilon \vec{v}) f_i(\vec{v}) \right) \right], \end{aligned} \quad (3.16)$$

qui est donc d'ordre ε . Si le Laplacien en vitesse $\Delta_c \widetilde{\mathcal{S}}_{e1}$ est d'ordre au moins zéro en ε aux petites vitesses $\vec{c} \rightarrow 0$, alors le dernier terme du membre de droite de (3.16) s'écrit à l'ordre le plus bas en ε :

$$\frac{16\pi^2 Z_i^2 e^4}{m_i^2} \text{Log} \Lambda_{ie} A_i \varepsilon \left(\frac{\partial \widetilde{\mathcal{S}}_{e1}}{\partial \vec{c}}(\varepsilon \vec{v}) \cdot \frac{\partial f_i}{\partial \vec{v}}(\vec{v}) \right).$$

Le terme de collision des ions sur les électrons peut aussi se mettre sous la forme :

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f_i}{\partial t} \right)_{ie} &= \frac{16\pi^2 Z_i^2 e^4}{m_i^2} \text{Log} \Lambda_{ie} \frac{n_e m_e^{1/2} m_i}{3} \left(\frac{1}{2\pi k_b T_e} \right)^{3/2} \frac{\partial}{\partial v_\alpha} \left[(v_\alpha - u_{i\alpha}) f_i(\vec{v}) + \frac{k_b T_e}{m_i} \frac{\partial f_i}{\partial v_\alpha}(\vec{v}) \right] \\ &+ X_{i\alpha} \frac{\partial f_i}{\partial v_\alpha}(\vec{v}), \end{aligned} \quad (3.17)$$

où

$$\vec{X}_i = \frac{16\pi^2 Z_i^2 e^4}{m_i^2} \text{Log} \Lambda_{ie} \left[\frac{n_e m_e^{1/2} m_i}{3} \left(\frac{1}{2\pi k_b T_e} \right)^{3/2} (\vec{u}_i - \vec{u}_e) + A_i \varepsilon \frac{\partial \widetilde{\mathcal{S}}_{e1}}{\partial \vec{c}}(0) \right],$$

est la force de friction collisionnelle entre l'espèce ionique i et les électrons. Cette force est composée d'un terme proportionnel à la différence des vitesses fluides ionique et électronique, et d'un second terme dit de force thermique proportionnel à l'anisotropie de la fonction de distribution électronique et donc relié au flux de chaleur électronique. La force de friction \vec{X}_i étant indépendante de la vitesse \vec{v} se comporte comme un champ électrique additionnel. Physiquement, cela traduit qu'à l'ordre le plus bas, la force thermique est ressentie identiquement par l'ensemble des ions de l'espèce i , et ce, indépendamment de leur vitesse, très inférieure à l'échelle de vitesse électronique. La force de friction vérifie de plus la relation suivante :

$$\vec{X}_i = -\frac{1}{n_i} \int \vec{v} \left(\frac{\partial f_i}{\partial t} \right)_{ie} d^3 v. \quad (3.18)$$

Cette relation permet, en utilisant la conservation de l'impulsion sous l'effet des collisions entre les électrons et les ions, d'obtenir une expression du champ électrique en fonction des grandeurs hydrodynamiques électroniques.

3.4.7 Equation électronique

Conditions d'électro-neutralité

Dans le problème considéré, le temps caractéristique d'intérêt correspond à l'échelle de temps ionique, proche du temps de collision moyen ion-ion τ_{ii} . Comme $\tau_{ii} \gg 1/\omega_{pe}$, ω_{pe} étant la pulsation plasma électronique (voir aussi chapitre 1), et comme l'échelle de longueur d'observation du problème est proche du libre parcours moyen des ions $\lambda_i \gg \lambda_{De}$, λ_{De} étant la longueur de Debye électronique, l'hypothèse d'électro-neutralité est

pertinente. Cette hypothèse se traduit par une relation sur les densités et sur les courants associés à chaque espèce de particules chargées :

$$n_e = \sum_{j=1}^n Z_j n_j \quad , \quad \vec{u}_e = \frac{1}{n_e} \sum_{j=1}^n Z_j n_j \vec{u}_j. \quad (3.19)$$

Equation sur la température électronique

Aux échelles de temps et d'espace considérées dans le problème, l'équation cinétique électronique se réduit, en raison de la petitesse du temps de collision électron-électron $\tau_{ee} \sim \varepsilon \tau_{ii}$ (voir, par exemple [13]) et à la grande taille du système par rapport au libre parcours moyen associé aux collisions électroniques, à un système d'équation fluide sur les grandeurs hydrodynamiques n_e , \vec{u}_e et T_e . Les relations d'électro-neutralité (3.19) permettent de déterminer n_e et \vec{u}_e à partir des densités et vitesses ioniques, respectivement. La température électronique est obtenue en résolvant une équation de conservation d'énergie.

L'équation sur la température électronique est obtenue en multipliant l'équation cinétique électronique (deuxième ligne de (3.28)) par $|\vec{c} - \varepsilon \vec{u}_e|^2$ et à intégrer sur la vitesse \vec{c} :

$$\frac{3}{2} \left(\frac{\partial T_e}{\partial t} + \vec{u}_e \cdot \frac{\partial T_e}{\partial \vec{r}} \right) + T_e \text{div} \vec{u}_e + \frac{1}{n_e} \frac{\partial Q_e}{\partial \vec{r}} = \frac{m_p}{2n_e} \sum_j \int |\vec{c} - \varepsilon \vec{u}_e|^2 \left(\frac{\partial \tilde{f}_e}{\partial t} \right)_{ej} d^3 c, \quad (3.20)$$

où le flux de chaleur électronique $\vec{Q}_e = Q_e \vec{e}_r$ est défini par :

$$Q_e = \int \frac{m_e}{2} |\vec{v} - \vec{u}_e|^2 (v - u_e) f_e(\vec{v}) d^3 v = \int \frac{m_e}{2} |\vec{c} - \varepsilon \vec{u}_e|^2 (c - \varepsilon u_e) \tilde{f}_e(\vec{c}) d^3 c.$$

Remarquons que pour obtenir (3.20), on suppose que le terme correctif \tilde{f}_{e1} , représentant l'écart à la Maxwellienne, ne modifie pas les moments hydrodynamiques électroniques, c'est à dire que :

$$\int \tilde{f}_{e1}(\vec{c}) d^3 c = 0, \quad \int (\vec{c} - \varepsilon \vec{u}_e) \tilde{f}_{e1}(\vec{c}) d^3 c = 0, \quad \int |\vec{c} - \varepsilon \vec{u}_e|^2 \tilde{f}_{e1}(\vec{c}) d^3 c = 0.$$

Pour calculer T_e , il apparaît donc nécessaire d'évaluer le flux de chaleur électronique Q_e et les termes de collision électron-ion, en ne retenant que les termes principaux.

On peut montrer que le terme de collision des électrons sur les ions intégré $|\vec{v} - \vec{u}_e|^2$ est d'ordre ε et peut se mettre sous la forme :

$$\begin{aligned} \frac{m_p}{2n_e} \sum_j \int |\vec{c} - \varepsilon \vec{u}_e|^2 \left(\frac{\partial \tilde{f}_e}{\partial t} \right)_{ej} d^3 c &= \sum_{j=1}^n \left\{ \frac{4\sqrt{2}\pi n_j \sqrt{m_e} Z_j^2 e^4 \text{Log} \Lambda_{ej}}{m_j} \left[\frac{T_j - T_e + \frac{A_j}{3}(u_e - u_j)^2}{T_e^{3/2}} \right] \right. \\ &\quad \left. + \frac{m_j n_j (u_j - u_e) X_j}{n_e} \right\} \end{aligned} \quad (3.21)$$

plus des corrections d'ordre ε^2 .

Il nous reste encore à évaluer le flux de chaleur électronique pour calculer T_e .

3.4.8 Conductivité électronique

Dans le problème de la modélisation de l'implosion et de l'allumage de la capsule, le flux de chaleur électronique est suffisamment faible pour pouvoir utiliser la forme locale de Spitzer. En effet, par opposition au cas de l'ablateur ou au cas de la paroi de la cavité, les longueurs de gradient de température électronique rencontrées au niveau de la capsule sont grandes. La description de Spitzer est donc a priori licite. Toutefois, par rapport au travail original de Spitzer, on souhaite pouvoir prendre en compte plusieurs espèces, ce qui n'est pas fait explicitement dans la référence [79]. Cette extension a été faite dans l'annexe de la référence [21] qui montre que la forme du flux de chaleur dans l'approximation de Spitzer étendue au cas multi-espèce est :

$$Q_e \sim \frac{T_e^{5/2}}{\varepsilon \tilde{Z} \text{Log} \Lambda_{ee}} \quad (3.22)$$

$$\text{où } \tilde{Z} = \frac{\sum_j Z_j n_j \text{Log} \Lambda_{ej}}{n_e \text{Log} \Lambda_{ee}}.$$

3.4.9 Equation du champ électrique

Dans notre approche cinétique où le temps caractéristique est le temps d'une collision typique ion-ion, l'hypothèse d'électro-neutralité du plasma est licite. Pour calculer le champ électrique, on ne résout plus les équations de Maxwell (qui deviennent redondantes avec la condition de quasi-neutralité), mais on repart de l'équation cinétique pilotant la fonction de distribution des électrons (3.28) que l'on multiplie par v_r et que l'on intègre sur \vec{v} . Cela nous donne une relation de conservation sur la quantité de mouvement des électrons. En ne retenant que les termes principaux, on obtient :

$$m_e \frac{\partial(n_e u_e)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \vec{v}} (P_e + m_e n_e u_e^2) + e \mathcal{E} n_e = m_e \sum_j \int v_r \left(\frac{\partial f_i}{\partial t} \right)_{ej} d^3 v = \sum_j m_j n_j X_{jr},$$

compte tenu de la relation sur la friction (3.18) et en utilisant la conservation de l'impulsion.

En négligeant les termes proportionnels à m_e , on peut exprimer le champ électrique en fonction du gradient de pression électronique et des forces de friction collisionnelles :

$$e \vec{\mathcal{E}} = \frac{1}{n_e} \left(\sum_j m_j n_j \vec{X}_j - \frac{\partial P_e}{\partial \vec{r}} \right). \quad (3.23)$$

On définit enfin le champ électrique effectif associé à l'espèce ionique i \mathcal{E}_i défini par :

$$\vec{\mathcal{E}}_i = \frac{Z_i}{n_e} \left(\sum_j m_j n_j \vec{X}_j - \frac{\partial P_e}{\partial \vec{r}} \right) - m_i \vec{X}_i. \quad (3.24)$$

Finalement, l'équation régissant l'évolution de la fonction de distribution ionique peut se mettre sous la forme :

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial f_i}{\partial \vec{r}} + \frac{\vec{\mathcal{E}}_i}{m_i} \cdot \frac{\partial f_i}{\partial \vec{v}} = \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial f_i}{\partial t} \right)_{ij} + \frac{4\sqrt{2\pi} Z_i^2 n_e \sqrt{m_e} \text{Log} \Lambda_{ie}}{3m_i T_e^{3/2}} \frac{\partial}{\partial v_\alpha} \left[(v_\alpha - u_{i\alpha}) f_i(\vec{v}) + \frac{T_e}{A_i} \frac{\partial f_i}{\partial v_\alpha}(\vec{v}) \right]. \quad (3.25)$$

3.5 Choix d'un système d'unités réduites

Dans l'écriture du code cinétique, on souhaite manipuler des nombres qui soient proches de l'unité, de manière à éviter des erreurs par "over" ou "underflow". Pour cela, on définit un système d'unités à partir duquel on adimensionne le système d'équations précédemment établi. Pour l'échelle de temps, il paraît naturel de choisir le temps de collision ion-ion dont un ordre de grandeur est donné par :

$$\tau_0 = \frac{(k_B T_0)^{3/2} m_p^{1/2}}{4\pi e^4 n_0}, \quad (3.26)$$

qui sera notre unité de temps. τ_0 est calculé à partir de valeurs de référence de densité n_0 et de température T_0 que l'on se donne au départ. On peut par exemple prendre $n_0 \sim 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ et $T_0 \sim 1 \text{ keV}$.

Pour l'échelle de longueur, on prend le libre parcours correspondant :

$$\lambda_0 = \left(\frac{k_B T_0}{m_p} \right)^{\frac{1}{2}} \tau_0 \quad (3.27)$$

A partir de n_0 , T_0 , τ_0 et λ_0 , on déduit de manière cohérente l'ensemble des unités du système pour exprimer toutes les grandeurs du problème, donné dans la table (3.1).

3.6 Modèle complet adimensionné

Le système adimensionné que l'on doit donc résoudre pour décrire le fonctionnement de la capsule au niveau cinétique est donc le suivant :

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial f_i}{\partial \vec{r}} + \frac{\vec{\mathcal{E}}_i}{A_i} \cdot \frac{\partial f_i}{\partial \vec{v}} = \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial f_i}{\partial t} \right)_{ij} + \left(\frac{\partial f_i}{\partial t} \right)_{ie}, \quad (3.28)$$

et ce, pour chaque espèce d'ions que l'on désire traiter. Dans notre problème, il s'agira du D , du T et des particules α produites par réactions de fusion.

Les termes de collision modélisant les collisions des électrons sur les ions cibles s'écrivent dans le système d'unités réduites selon :

$$\left(\frac{\partial f_i}{\partial t} \right)_{ie} = \frac{\varepsilon \sqrt{2} Z_i^2 n_e \text{Log} \Lambda_{ie}}{3\sqrt{\pi} A_i T_e^{3/2}} \frac{\partial}{\partial v_\alpha} \left[(v_\alpha - u_{i\alpha}) f_i(\vec{v}) + \frac{T_e}{A_i} \frac{\partial f_i}{\partial v_\alpha}(\vec{v}) \right]$$

où $\varepsilon = \sqrt{m_e/m_p} \sim 0.0233$.

TABLE 3.1 – Système d’unités utilisé pour adimensionner le système d’équations de Vlasov-Fokker-Planck en vue de leur résolution numérique. Les différentes grandeurs de référence sont déduites d’une densité de référence n_0 et d’une énergie thermique de référence T_0 .

Grandeur	Unité
densité	n_0 (valeur de référence arbitraire)
énergie thermique	T_0 (valeur de référence arbitraire)
temps	$\tau_0 = T_0^{3/2} m_p^{1/2} / 4\pi e^4 n_0$
longueur	$\lambda_0 = (T_0/m_p)^{1/2} \tau_0 = T_0^2 / 4\pi e^4 n_0$
vitesse	$v_0 = (T_0/m_p)^{1/2} = \lambda_0 / \tau_0$
fonction de distribution	$f_0 = n_0 / v_0^3$
premier pot. de Rosenbluth	$\mathcal{S}_0 = n_0 / v_0$
second pot. de Rosenbluth	$\mathcal{T}_0 = n_0 v_0$
champ électrique (\mathcal{E}_i)	$\mathcal{E}_0 = m_p v_0^2 / \lambda_0 = m_p \lambda_0 / \tau_0^2$
flux de chaleur	$Q_0 = n_0 T_0^{3/2} / m_p^{1/2}$

On rappelle le champ effectif, pour lequel on négligera les termes de friction (qui se compensent exactement dans le cas d’une seule espèce d’ions) :

$$\mathcal{E}_i = -\frac{Z_i}{n_e} \frac{\partial P_e}{\partial x},$$

où P_e est la pression électronique.

Le terme de collision entre les espèces ioniques i et j s’écrit en unités réduites :

$$\left(\frac{\partial f_i}{\partial t} \right)_{ij} = \frac{4\pi Z_i^2 Z_j^2}{A_i^2} \text{Log} \Lambda_{ij} \frac{\partial}{\partial v_\alpha} \left[\frac{A_i}{A_j} \frac{\partial \mathcal{S}_j}{\partial v_\alpha} f_i - \frac{\partial^2 \mathcal{T}_j}{\partial v_\alpha \partial v_\beta} \frac{\partial f_i}{\partial v_\beta} \right] \quad (3.29)$$

où les potentiels de Rosenbluth réduits \mathcal{S}_j et \mathcal{T}_j sont définis par

$$\mathcal{S}_j = -\frac{1}{4\pi} \int \frac{f_j(\vec{v}')}{|\vec{v} - \vec{v}'|} d^3 v' \quad \text{et} \quad \mathcal{T}_j = -\frac{1}{8\pi} \int |\vec{v} - \vec{v}'| f_j(\vec{v}') d^3 v',$$

intégrales qu’on calculera en résolvant les équations de Poisson dans l’espace des vitesses $\Delta_v \mathcal{S}_j = f_j$ et $\Delta_v \mathcal{T}_j = \mathcal{S}_j$ avec des conditions aux limites appropriées.

Enfin, l’équation sur la température électronique s’écrit dans le système d’unités réduites sous la forme :

$$\begin{aligned} \frac{3}{2} \left(\frac{\partial T_e}{\partial t} + u_e \frac{\partial T_e}{\partial r} \right) + T_e \text{div} u_e - \frac{1}{n_e} \text{div} \left(\kappa \frac{\partial T_e}{\partial r} \right) = \\ = \sum_{j=1}^n \left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/2} \frac{\varepsilon n_j Z_j^2 \text{Log} \Lambda_{ej}}{A_j} \left[\frac{T_j - T_e + \frac{A_j}{3} (u_e - u_j)^2}{T_e^{3/2}} \right], \end{aligned} \quad (3.30)$$

où on utilise le modèle de conductivité de Spitzer étendu au cas multi-espèce et écrit dans le système sans dimension selon :

$$\kappa \approx \frac{8\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}} \frac{T_e^{5/2}}{\varepsilon \tilde{Z} \text{Log} \Lambda_{ee}}. \quad (3.31)$$

On cherche ensuite à coupler ce système d'équations cinétiques/fluide avec une modélisation cinétique des particules α suprathermiques, produites par réactions de fusion. Il s'agit alors de modéliser le couplage entre des populations ioniques caractérisées par des échelles d'énergie très différentes. Une analyse du couplage multi-échelle est nécessaire au préalable, afin d'établir une modélisation pertinente pouvant être résolue en des temps de calcul raisonnables. Ceci fait l'objet du chapitre suivant.

4

Approche cinétique à deux échelles de vitesse pour les plasmas de fusion en FCI

Sommaire

4.1	Introduction et motivation de l'étude	169
4.2	Nécessité d'une approche cinétique pour les particules suprathermiques	170
4.3	Equation de Vlasov-Fokker-Planck pour les particules α	172
4.4	Importance relative de l'effet des ions et des électrons sur le ralentissement des particules α	172
4.5	Description multi-échelle de la fonction de distribution des particules α	173
4.5.1	Discussion physique	173
4.5.2	Décomposition multi-échelle de l'opérateur de Fokker-Planck	175
4.5.3	Analyse de la partie diffusion de l'opérateur de Fokker-Planck	178

4.1 Introduction et motivation de l'étude

Dans ce chapitre, on se propose d'étendre la modélisation cinétique ionique du combustible DT de cibles de FCI en traitant les particules α suprathermiques créées par réactions de fusion, et ce, au niveau cinétique et de manière cohérente avec le modèle hybride présenté au chapitre précédent. Rappelons qu'une approche cinétique détaillée est *a priori* nécessaire pour modéliser les particules suprathermiques, dont le libre parcours est de l'ordre de la taille du système (ici, le point chaud de la cible d'ignition).

Notre objectif est de développer une modélisation cinétique du *processus d'ignition et de combustion* des cibles, tout en conservant des temps de résolution numérique restant raisonnables en vue de l'application à des configurations réalistes de cible.

La difficulté d'une telle approche réside dans le couplage entre des populations ioniques caractérisées par des échelles d'énergie très différentes :

- Les ions dits thermiques D,T, caractérisés par une énergie de l'ordre du keV et formant l'essentiel de la masse du plasma en implosion.

- Les particules α suprathermiques, créées à 3.52 MeV par les réactions de fusion.

Le problème à traiter est clairement caractérisé par deux échelles d'énergie couplées. Une approche directe consistant à discrétiser l'ensemble du domaine des vitesses, qui s'étend jusqu'au vitesses suprathermiques ($v \sim 1.3 \times 10^9$ cm/s) avec un pas δv uniforme et adapté à la résolution de l'échelle la plus petite (c'est à dire $\delta v \ll v_i^{th}$, v_i^{th} étant l'échelle de vitesse thermique) risque d'entraîner des temps calculs trop longs et un coût mémoire trop lourd pour pouvoir traiter des configurations réelles. On doit chercher à optimiser la répartition de l'effort de calcul, en exploitant la structure multi-échelle particulière du problème considéré.

Pour résoudre le problème efficacement, on développe une technique multi-échelle spécifique basée sur l'analyse du processus de ralentissement des particules rapides décrit par l'équation de Vlasov-Fokker-Planck. En particulier, on montre que l'on peut décomposer la fonction de distribution des particules α sous la forme de deux composantes :

- une composante suprathermique, évoluant sur un large domaine de vitesses, mais avec une échelle de variation relativement lente.
- une composante thermique, qui évolue rapidement sur un support localisé de l'espace des vitesses, concentré dans le domaine des vitesses thermiques.

Plus précisément, ces composantes sont définies par un *système d'équations couplées*, obtenu par une réécriture particulière des termes de l'opérateur de Fokker-Planck pilotant le ralentissement des particules α . On montre que le système obtenu est bien équivalent à l'équation de Vlasov-Fokker-Planck, ce qui assure que la stratégie à deux composantes garantit bien une conservation des moments de la fonction de distribution totale des particules α .

Cette technique de décomposition nous permet de mieux répartir l'effort de calcul, en discrétisant chaque composante sur un maillage adapté à l'échelle de variation à traiter. A partir de l'écriture du système, on déduit une méthode numérique pour résoudre le couplage entre les deux échelles d'énergie, découlant naturellement de la forme des termes de l'opérateur de Fokker-Planck.

Comparée à l'approche par homogénéisation présentée dans la première partie du manuscrit, la méthode mise au point ici conserve les deux échelles, en les traitant *conjointement*, mais de façon couplée. La difficulté de cette stratégie consiste à établir la loi de couplage, cette dernière étant dictée par la structure du problème.

Ce chapitre reprend une partie de la publication [P3] traitant de l'analyse multi-échelle du problème du ralentissement des particules suprathermiques.

4.2 Nécessité d'une approche cinétique pour les particules suprathermiques

Dans les codes hydrodynamiques utilisés en FCI, les particules suprathermiques sont en général modélisées de manière approchée par un modèle de type diffusion multi-groupe. Ces méthodes sont très rapides et relativement pratiques à coupler avec le modèle fluide. Cependant, les méthodes de type diffusion ne sont valables que lorsque le libre parcours des particules traitées est petit devant l'échelle de longueur de caractéristique du système.

Cette hypothèse n'est pas vérifiée par les particules suprathermiques produites par réactions de fusion. Il est alors nécessaire de corriger artificiellement le flux diffusif associé aux particules rapides, en introduisant des limiteurs de flux (voir par exemple [22], [70]) afin d'empêcher le développement de comportement non-physique. Ceci devient particulièrement critique lorsque le flux approche la limite free-streaming. Les profils de dépôt d'énergie sont calculés de manière approchée, ce qui peut avoir des répercussions sur le calcul du seuil d'ignition des cibles et sur le gain d'énergie.

Des méthodes de type Monte Carlo (voir par exemple [49, 20]) peuvent également être employées pour résoudre l'équation de Fokker-Planck de façon générale. Dans une telle approche, les fonctions de distribution sont représentées par une somme de masses de Dirac. Chaque particule Monte Carlo est caractérisée par sa position, sa vitesse et par un poids numérique proportionnel à son énergie. Ces quantités évoluent dans le temps, de manière cohérente avec l'équation de Vlasov-Fokker-Planck, tandis que la poursuite spatiale des particules Monte Carlo s'effectue dans l'ensemble du maillage du système. La précision des méthodes Monte Carlo varie comme $N^{-1/2}$, N étant le nombre total de particules Monte Carlo. Pour avoir une bonne statistique, il est nécessaire de prendre un très grand nombre de particules ($N \gg 1$), ce qui peut générer des temps calculs plus longs. Des techniques de réduction de variance peuvent permettre de diminuer le bruit numérique. Ces méthodes sont intéressantes lorsque la dimension du problème augmente (par exemple en géométrie 2D ou 3D). Pour des problèmes 1D, où le nombre de variables indépendantes à traiter est relativement faible, les méthodes Monte Carlo se révèlent moins précises que les approches déterministes. En particulier, les approches de type Monte Carlo ne sont pas forcément les plus adaptées pour l'étude des effets cinétiques, qui nécessitent la modélisation fine des queues des fonctions de distribution. En outre, le couplage entre les particules suprathermiques et le bain thermique est en général traité de manière approximative dans les approches Monte Carlo usuelles, en retirant de manière forcée les particules ralenties en dessous d'un certain seuil d'énergie. Ce seuil est défini de manière artificielle, pas nécessairement cohérente avec le modèle de Vlasov-Fokker-Planck. Partant, le processus de thermalisation n'est pas modélisé rigoureusement.

Des méthodes déterministes de type S_n peuvent également s'appliquer à la résolution de l'équation de Fokker-Planck (voir notamment [40, 65, 44]). Dans ces approches, le flux de particules α est discrétisé sur un maillage angulaire, auquel est associé un ensemble discret de poids numériques. Ces approches sont plus précises que les méthodes de type diffusion, mais peuvent être mises en défaut dans la limite faiblement collisionnelle. Aussi, la thermalisation est traitée de manière approximative, reprenant la stratégie précédemment décrite pour les approches Monte Carlo, basée sur la définition d'un seuil en énergie arbitrairement fixé. Les méthodes S_n sont souvent employées pour simuler le transport neutronique et nécessitent d'importantes ressources informatiques.

Ainsi, la modélisation du transport des particules suprathermique, et du processus d'interaction avec les particules thermiques (ions D,T) nécessite une approche cinétique soignée et auto-consistante.

4.3 Equation de Vlasov-Fokker-Planck pour les particules α

La fonction de distribution $f_\alpha(\vec{r}, \vec{v}, t)$ associée aux particules α caractérisées par une charge $Z_\alpha e$ et une masse m_α est gouvernée par l'équation de Vlasov-Fokker-Planck :

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial f_\alpha}{\partial \vec{r}} + \frac{Z_\alpha e \vec{\mathcal{E}}}{m_\alpha} \cdot \frac{\partial f_\alpha}{\partial \vec{v}} = \sum_i \left. \frac{\partial f_\alpha}{\partial t} \right|_{\alpha i} + \left. \frac{\partial f_\alpha}{\partial t} \right|_{\alpha e} + \left. \frac{\partial f_\alpha}{\partial t} \right|_{\text{fuse}}. \quad (4.1)$$

Les deux premiers termes du membre de droite de l'équation décrivent l'effet des collisions impliquant les particules α :

- $\partial f_\alpha / \partial t|_{\alpha e}$ modélise les collisions α -électrons,
- $\sum_i \partial f_\alpha / \partial t|_{\alpha i}$ décrit les collisions entre les particules α et les autres espèces d'ions thermiques. Comme la densité des espèces thermiques est significativement plus importante que la densité de particules α suprathermiques, le terme de collision non-linéaire entre les particules rapides peut être négligé. Toutefois, le couplage entre les particules α rapides et les particules α thermalisées est naturellement inclus dans le modèle.

Ces termes de collisions sont explicitement données par (3.17) pour le ralentissement électronique et (3.4) pour le ralentissement ionique.

Le dernier terme de l'équation (4.1) modélise la création de particules α suprathermiques par réactions de fusion. Le terme source est supposé isotrope et est donné par :

$$\left. \frac{\partial f_\alpha}{\partial t} \right|_{\text{fuse}} = \mathcal{R}_{DT}(\vec{r}, t) \frac{\delta(v - v_h)}{4\pi v^2}, \quad (4.2)$$

où $v_h = 1.3 \times 10^9 \text{ cm.s}^{-1}$ est la vitesse initiale des particules α suprathermiques. Cette vitesse correspond à l'énergie initiale des produits de fusion $\sim 3.52 \text{ MeV}$. \mathcal{R}_{DT} désigne le taux de réaction de fusion exprimé à partir des fonctions de distribution de l'espèce D et T respectivement :

$$\mathcal{R}_{DT}(\vec{r}, t) = n_D n_T \langle \sigma v \rangle_{DT} = \int \int f_D(\vec{r}, \vec{v}_D, t) f_T(\vec{r}, \vec{v}_T, t) |\vec{v}_D - \vec{v}_T| \sigma_{DT}(|\vec{v}_D - \vec{v}_T|) d^3 v_D d^3 v_T. \quad (4.3)$$

Les fonctions de distribution f_D et f_T sont elles-même solution de l'équation de Vlasov-Fokker-Planck écrite sur pour chacune des espèces D et T respectivement, et ne sont pas nécessairement des distributions Maxwelliennes. Les intégrales dans Eq. (4.3) sont calculées sur l'ensemble du domaine des vitesses tri-dimensionnel.

4.4 Importance relative de l'effet des ions et des électrons sur le ralentissement des particules α

Les particules rapides créées par réactions de fusion sont réparties de manière isotrope dans le référentiel associé au plasma thermique. Elles sont ensuite ralenties par le jeu des collisions Coulombiennes sur les électrons, conformément à Eq. (3.17), et sur les ions

thermiques, suivant Eq. (3.4). On peut estimer l'importance relative des électrons et des ions sur le ralentissement des produits de fusion en ne retenant que les termes de friction dynamique issus des opérateurs de Fokker-Planck (3.17) et (3.4), associés aux électrons et aux ions thermiques respectivement. Le rapport $R_{i/e}$ de l'effet des ions thermiques sur celui des électrons peut alors être approché par :

$$R_{i/e} = \left. \frac{\partial f_\alpha}{\partial t} \right|_{\alpha i} / \left. \frac{\partial f_\alpha}{\partial t} \right|_{\alpha e} \sim \frac{T_e^{3/2}}{v^3 m_e^{1/2} m_i} \sim \frac{T_e^{3/2}}{v^3 m_i^{3/2} \varepsilon}.$$

Le rapport $R_{i/e}$ fait donc intervenir une vitesse seuil caractéristique :

$$v_c = \varepsilon^{-1/3} (T_e/m_i)^{1/2}, \quad (4.4)$$

de sorte que $R_{i/e} \sim (v_c/v)^3$.

Le début du processus de ralentissement des particules rapides est essentiellement piloté par l'influence des électrons. Puis, lorsque la vitesse des particules rapides ralenties devient proche de la vitesse de coupure v_c , l'effet des ions thermiques devient comparable à celui des électrons. La phase finale du processus de thermalisation est enfin dominée principalement par l'effet des ions thermiques. En faisant l'approximation $T_i \sim T_e$, on peut estimer la vitesse de coupure par $v_c \sim \varepsilon^{-1/3} v_i^{th} \sim 3.6 v_i^{th}$, v_i^{th} étant l'échelle de vitesse thermique caractéristique pour les ions D et T.

Ainsi, l'effet des ions thermiques domine le ralentissement des particules α dès que la vitesse des α devient inférieure à $v_c \sim 3.6 v_i^{th}$. Nous qualifierons de telles particules α , encore rapides par rapport au plasma thermique mais ayant ralenti sur les électrons, comme étant "modérément suprathermiques".

4.5 Description multi-échelle de la fonction de distribution des particules α

4.5.1 Discussion physique

De par l'analyse précédente, nous savons que les particules rapides à 3.52 MeV sont tout d'abord ralenties par l'effet des collisions sur les électrons. Cette première phase du ralentissement des particules α est donc décrite par :

$$\left. \frac{\partial f_\alpha}{\partial t} \right|_{\text{coll}} = \frac{1}{\tau_{\alpha e}} \frac{\partial}{\partial \vec{v}} \cdot \left[(\vec{v} - \vec{u}_e) f_\alpha(\vec{v}) + \frac{T_e}{m_\alpha} \frac{\partial f_\alpha}{\partial \vec{v}}(\vec{v}) \right]. \quad (4.5)$$

Lorsque $v \gg u_e$, le terme de friction dynamique (premier terme dans le membre de droite de (4.5)) domine de sorte que la fonction de distribution des particules α évolue suivant :

$$\left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} \right)_{\text{coll}} \approx \frac{1}{\tau_{\alpha e}} \frac{1}{v^2} \frac{\partial}{\partial v} [v^3 f_\alpha(v)]. \quad (4.6)$$

La solution stationnaire de (4.6) se comporte qualitativement comme $f_\alpha \sim 1/v^3$, où v est la vitesse des particules rapides. Par conséquent, tant que la vitesse des particules α reste

suffisamment grande devant l'échelle de vitesse thermique, leur fonction de distribution varie de manière relativement douce sur tout le domaine de vitesse. On peut définir une échelle de typique de variation, v_α^{ST} , définie par :

$$v_\alpha^{ST} \sim f_\alpha^{ST} / \frac{\partial f_\alpha^{ST}}{\partial v}. \quad (4.7)$$

Cette échelle de variation associée à la fonction de distribution des particules rapides est en particulier plus grande que l'échelle thermique $v_i^{th} = (T_i/m_i)^{1/2}$ propre aux ions cibles.

Dans un second temps, lorsque la vitesse des particules α dites "modérément supra-thermiques" se rapproche de l'échelle de vitesse thermique, les collisions entre particules α et les espèces ioniques thermiques tendent à dominer la fin du processus de thermalisation. La relaxation des particules modérément supra-thermiques sur les ions thermiques est alors décrite par :

$$\left. \frac{\partial f_\alpha}{\partial t} \right|_{\text{coll}} = \sum_i 4\pi\Gamma_{\alpha i} \frac{\partial}{\partial \vec{v}} \cdot \left(\frac{m_\alpha}{m_i} f_\alpha \frac{\partial \mathcal{S}_i}{\partial \vec{v}} \right), \quad (4.8)$$

où, par souci de clarté, nous ne retenons que l'effet de la friction dynamique, qui est dominant dans cette phase du ralentissement. Nous traiterons séparément l'effet de la partie diffusive de l'opérateur de Fokker-Planck. Qualitativement, du point de vue des particules rapides, on peut considérer que la fonction de distribution décrivant les ions cibles thermiques i apparaît très *localisée* dans l'espace des vitesses. Il est alors légitime d'écrire : $f_i(\vec{v}) = n_i \delta^3(\vec{v})$ (en supposant une vitesse moyenne nulle). En outre, en développant la divergence en vitesse apparaissant dans le membre droite de Eq. (4.8), on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial \vec{v}} \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{S}_i}{\partial \vec{v}} f_\alpha \right) \simeq \frac{\partial \mathcal{S}_i}{\partial \vec{v}} \cdot \frac{\partial f_\alpha}{\partial \vec{v}} + f_\alpha \Delta_v \mathcal{S}_i.$$

Utilisant l'approximation $f_i(\vec{v}) = n_i \delta^3(\vec{v})$, pertinente du point de vue des particules rapides, le premier potentiel de Rosenbluth associé aux ions thermiques cibles i est alors connu explicitement : $\mathcal{S}_i(v) \sim -n_i/(4\pi v)$. En calculant le gradient en vitesse de ce potentiel, on modélise le ralentissement des particules rapides par :

$$\left. \frac{\partial f_\alpha}{\partial t} \right|_{\text{coll}} = \sum_i 4\pi\Gamma_{\alpha i} \frac{m_\alpha}{m_i} \left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial \vec{v}} \cdot \frac{n_i}{4\pi v^2} \vec{e}_v + f_\alpha f_i \right). \quad (4.9)$$

Les deux termes du membre droite Eq.(4.9) s'interprètent physiquement :

- Le premier terme $\sim \partial f_\alpha / \partial \vec{v}$ varie selon la grande échelle de vitesse v_α^{ST} associée aux particules rapides. Qualitativement, cette échelle de vitesse traduit une variation douce et lente de la fonction de distribution supra-thermique. Cette dernière s'étale sur un large domaine de vitesse, allant jusqu'à la vitesse initiale des particules rapides produites à 3.52 MeV ($v_h \sim 1.3 \times 10^9$ cm.s⁻¹). Aussi, notons que le terme $\sim \frac{n_i}{4\pi v^2} \frac{\partial f_\alpha}{\partial \vec{v}}$ traduit une advection conservative dans l'espace des vitesses vers la vitesse $v = 0$. Le taux d'advection associé $\frac{n_i}{4\pi v^2}$ augmente lorsque v se rapproche de 0 de sorte que la solution de l'équation :

$$\left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} \right)_{\text{coll}} = \sum_i 4\pi\Gamma_{\alpha i} \frac{m_\alpha}{m_i} \left[\frac{\partial f_\alpha}{\partial \vec{v}} \cdot \frac{n_i}{4\pi v^2} \vec{e}_v \right] \quad (4.10)$$

tend vers une constante f_0 correspondant à l'état stationnaire de (4.10). Qualitativement, la fonction de distribution tend à être "étirée" et "aplatie" de plus en plus vite en s'approchant de $v = 0$. Pour la fonction de distribution asymptotiquement constante, le courant de ralentissement est alors indépendant de v , et proportionnel à la fonction de distribution en $v = 0$.

- Le second terme $\sim f_\alpha f_i$ apparaît très localisé dans l'espace des vitesses et se comporte qualitativement comme une fonction Dirac du point de vue des particules rapides. Ce terme donne naissance à un "condensat" de particules α thermalisées qui évoluent sur la petite échelle de vitesse thermique $v_i^{th} \ll v_\alpha^{ST}$.

Pour donner une analogie fluide de ce processus, tout se passe comme si la fonction de distribution associée aux particules rapides se "déversait" dans un "puits" situé en $v = 0$, la partie tombant dans le puits alimentant le condensat de particules thermalisées, dont le support correspond à l'échelle de vitesse thermique.

Cette analyse quantitative montre intuitivement comment le caractère *bimodal* de la fonction de distribution des particules α se forme. La distribution peut alors être vue comme la superposition de deux composantes :

- Une composante suprathermique, alimentée par les réactions de fusion et évoluant selon une grande échelle de vitesse.
- Une composante thermique, correspondant à la partie thermalisée de la fonction de distribution des particules α , dont la taille du support en vitesse est proche de l'échelle thermique propre aux ions cibles D et T. Notons que cette composante localisée n'est pas encore complètement thermalisée au moment de sa création. Le terme source pilotant cette composante est en effet proportionnel à $\sum_i 4\pi\Gamma_{\alpha i}f_i$. Il reste donc une étape supplémentaire de relaxation de la composante thermique sur les ions thermiques D et T, afin d'aboutir à la thermalisation complète des produits de fusion.

La figure Fig. 4.1 illustre schématiquement le caractère multi-échelle du processus de relaxation et de thermalisation des particules α .

Nous développons dans la suite une technique de résolution multi-échelle en vitesse adaptée au caractère bimodal de la fonction des distributions des α solution de l'équation de Vlasov-Fokker-Planck Eq. (4.1).

4.5.2 Décomposition multi-échelle de l'opérateur de Fokker-Planck

En utilisant les approximations bien connues des potentiels de Rosenbluth lorsque la température des cibles devient nulle [75], il est possible de ré-arranger les termes de l'équation de Fokker-Planck, de manière à modéliser l'évolution de la fonction de distribution des particules α par un jeu de deux composantes :

$$f_\alpha(\vec{v}, t) = f_\alpha^{ST}(\vec{v}, t) + f_\alpha^T(\vec{v}, t), \quad (4.11)$$

où : f_α^{ST} désigne la composante suprathermique, définie sur un grand domaine en vitesse et caractérisée par une grande échelle de variation v_α^{ST} , plus grande que l'échelle thermique v_i^{th} des cibles. f_α^T est la composante thermique, très localisée en vitesse au voisinage des cibles thermiques et évanescence dans le domaine des vitesses suprathermiques.

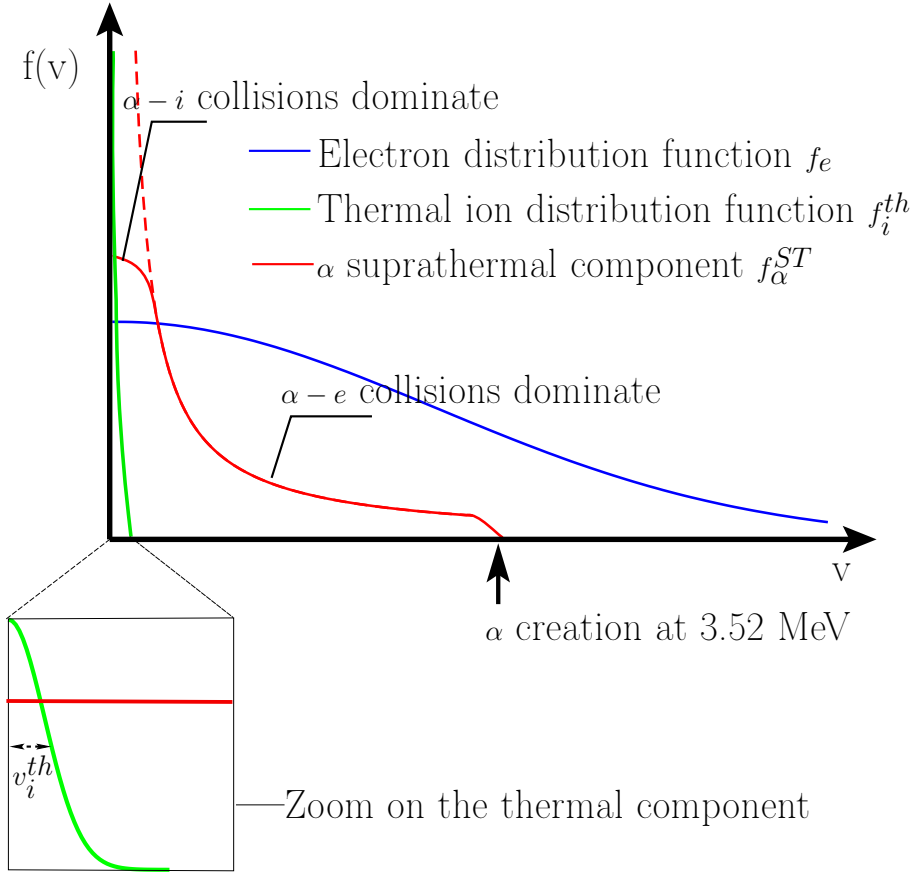


FIGURE 4.1 – Représentation schématique de la relaxation collisionnelle des particules α sur les ions cibles thermiques i .

La composante suprathermique de la fonction de distribution des particules α (rouge) varie sur l'échelle de vitesse $v_\alpha^{ST} \gg v_i^{th}$. La fonction de distribution électronique (bleu) est proche d'une fonction Maxwellienne caractérisée par une largeur $v_e^{th} \gg v_i^{th}$. Les fonctions de distribution décrivant les ions thermiques (vert) évoluent sur l'échelle de vitesse thermique $\sim v_i^{th}$. A cette échelle, la composante suprathermique apparaît quasi-constante. La ligne en pointillés rouges représente la solution stationnaire de l'Eq. (4.6). Il s'agit de la solution du problème de relaxation collisionnelle des particules suprathermiques sur les électrons. La solution stationnaire se comporte en $\sim 1/v^3$.

L'effet des collisions entre les particules α ralenties et les ions thermiques tend à dominer la fin du processus de ralentissement et empêche la divergence de la solution lorsque $v \rightarrow 0$. Du point de vue de la composante suprathermique, cette relaxation finale sur les ions thermiques correspond à une advection dans l'espace des vitesses, conformément à l'Eq. (4.10).

Remarquons que les deux composantes définies dans Eq. (4.11) existent dans tout le domaine des vitesses. En outre, cette superposition est quelque peu artificielle, la grandeur physique d'intérêt étant la somme des deux composantes $f_\alpha(\vec{v}, t)$. Cette séparation est en fait utile à des fins numériques, et nous permet de développer une stratégie efficace et originale de résolution, adaptée au caractère bimodal de la fonction de distribution des

produits de fusion.

L'idée est alors de traiter chaque composante séparément, et de façon couplée. L'opérateur de Fokker-Planck, donné par Eq. (3.4), est alors transformé en un *système de deux équations* gouvernant les deux composantes f_α^{ST} and f_α^T , respectivement :

$$\begin{aligned}\partial_t f_\alpha^{ST}|_{\alpha i} &= \Gamma_{\alpha i} \frac{n_i}{v^2} \partial_v f_\alpha^{ST} - n_i \Gamma_{\alpha i} f_\alpha^{ST} \frac{\delta(v)}{v^2}, \\ \partial_t f_\alpha^T|_{\alpha i} &= 4\pi \Gamma_{\alpha i} \partial_{\vec{v}} \cdot (f_\alpha^T \partial_{\vec{v}} \mathcal{S}_i) + 4\pi \Gamma_{\alpha i} f_i f_\alpha^{ST} (v=0).\end{aligned}\quad (4.12)$$

Les équations qui précèdent sont écrites dans le référentiel relatif aux ions thermiques. L'indice i est relatif à toutes les fonctions de distribution correspondant à l'échelle thermique, y compris la composante thermalisée associée aux particules α .

Le système (4.12) décrit ainsi le couplage entre les composantes suprathermiques et thermiques. La fonction de couplage est proportionnelle au produit des fonctions de distribution $\sim f_\alpha^{ST} f_i$. Ce terme est soustrait de l'équation pilotant la composante suprathermique f_α^{ST} , pour être ensuite ré-introduit en tant que *terme source* dans l'équation régissant la composante thermique f_α^T . La fonction de couplage prend alors deux formes, celles-ci étant étroitement liées à l'échelle de vitesse que l'on considère :

- Du point de vue de la composante suprathermique, l'approximation $f_\alpha^{ST} f_i \sim n_i f_\alpha^{ST} \delta^3(\vec{v})$ est licite comme les cibles thermiques apparaissent très localisées dans l'espace des vitesses.
- Du point de vue de la composante thermique, évoluant sur la petite échelle v_i^{th} , on peut écrire $f_\alpha^{ST} f_i \sim f_\alpha^{ST}(0) f_i$. La composante suprathermique est en effet par construction quasi-constante sur le support en vitesse des cibles thermiques. Le terme $\sim f_\alpha^{ST}(0) f_i$ apparaît comme un terme source dans l'équation définissant la composante thermique. Il traduit une alimentation de la composante thermique par la composante suprathermique.

Remarque 4.5.1 Dans l'équation (4.12), nous ne tenons pas compte du processus inverse, correspondant à l'alimentation d'une composante suprathermique par la composante thermique. C'est ce qui se produirait si l'on modélisait l'effet des collisions à grand angle, de type $\alpha^{ST} + D \rightarrow \alpha + D^{ST}$, impliquant des particules α rapides et des particules thermiques. Cet effet sort du cadre du modèle de Fokker-Planck et doit être décrit par un opérateur intégral de type Boltzmann. Ce mécanisme collisionnel peut alors générer une composante suprathermique pour les espèces D ou T et peut naturellement s'inclure dans le cadre bimodal que l'on a mis en place pour les particules α (voir sur ce point le chapitre 7). Notons toutefois que l'occurrence d'une collision de ce type est environ $\sim 1/\ln \Lambda$ plus petite que les collisions caractérisées par une succession de petites déviations, bien décrites par l'opérateur de Fokker-Planck.

Remarque 4.5.2 Notons que cette description multi-échelle de la fonction de distribution associée aux particules α reste pertinente tant que le seuil de vitesse v_c en dessous duquel les ions thermiques dominent la fin du ralentissement est significativement plus grand que la vitesse thermique des ions cibles v_i^{th} . Dans la Fig.4.1, le seuil de vitesse v_c correspond à la vitesse à partir de laquelle la composante suprathermique diverge de la solution de

Eq. (4.6) modélisant l'effet des collisions entre les particules α rapides et les électrons. Lorsque $v < v_c$, la composante suprathermique est tronquée par l'effet des collisions $\alpha - i$ et tend à être quasi-constante sur tout le domaine de vitesse thermique. On peut reprendre l'estimation du seuil de vitesse v_c en se basant sur le rapport $R_{i/e}$ des termes de friction dynamique ionique/électronique appliqués aux particules α (voir section 4.4). On a :

$$v_c = \varepsilon^{-1/3} (T_e/m_i)^{1/2} \sim 3.6 v_i^{th}. \quad (4.13)$$

La condition $v_c \gg v_i^{th}$ est ainsi satisfaite. Ceci rend pertinente la description de la fonction de distribution des particules α sous la forme de deux composantes évoluant sur des échelles de vitesse distinctes. La méthode s'applique en particulier pour modéliser les produits de fusion dans des conditions plasmas correspondant à l'ignition et à la combustion de configurations typiques rencontrées en FCI.

4.5.3 Analyse de la partie diffusion de l'opérateur de Fokker-Planck

Pour terminer ce chapitre relatif à l'étude du ralentissement des produits de fusion, nous revenons à l'équation de Fokker-Planck (3.4) et étudions l'effet du terme de diffusion en vitesse, correspondant au second terme du membre droite de l'équation (3.4) :

$$\left. \frac{\partial f_\alpha}{\partial t} \right|_{\alpha i} = - \sum_i 4\pi \Gamma_{\alpha i} \frac{\partial}{\partial \vec{v}} \cdot \left(\nabla_v^2 \mathcal{T}_i \cdot \frac{\partial f_\alpha}{\partial \vec{v}} \right). \quad (4.14)$$

\mathcal{T}_i est le second potentiel de Rosenbluth associé aux particules cibles. La notation $\nabla_v^2(\cdot)$ désigne l'opérateur Hessian $\partial_{\alpha\beta}^2(\cdot)$. On définit le courant de ralentissement α $\vec{J}_{\alpha i}$ associé aux particules par :

$$\vec{J}_{\alpha i} = - \sum_i 4\pi \Gamma_{\alpha i} \nabla_v^2 \mathcal{T}_i \partial f_\alpha / \partial \vec{v}. \quad (4.15)$$

En approchant les fonctions de distribution des cibles thermiques par une fonction Dirac, le second potentiel \mathcal{T}_i peut être estimé par son expression à température nulle, à savoir $\mathcal{T}_i(v) \sim -n_i v / (8\pi)$. Cette estimation est pertinente du point de vue des particules rapides. Le Hessian $\nabla_v^2 \mathcal{T}_i$ se calcule alors de manière explicite :

$$\nabla_v^2 \mathcal{T}_i \sim -\frac{n_i}{8\pi v} \left(\text{Id} - \frac{\vec{v} \otimes \vec{v}}{v^2} \right). \quad (4.16)$$

En employant avantageusement une paramétrisation polaire de l'espace des vitesses $\vec{v} = v \vec{e}_v$, où $(\vec{e}_v, \vec{e}_\theta)$ est la base polaire de l'espace des vitesses suprathermiques, l'expression du Hessian (4.16) se simplifie suivant :

$$\nabla_v^2 \mathcal{T}_i \sim -\frac{n_i}{8\pi v} \vec{e}_\theta \otimes \vec{e}_\theta. \quad (4.17)$$

Le courant de ralentissement Eq. (4.15) associé à la partie diffusive de l'opérateur de Fokker-Planck est donc essentiellement transverse, c'est à dire perpendiculaire à la vitesse locale \vec{v} . Ainsi, peut-on écrire :

$$\vec{J}_{\alpha i} \sim -\frac{\Gamma_{\alpha i} n_i}{2} \frac{\partial f_\alpha}{\partial \theta} \vec{e}_\theta. \quad (4.18)$$

Le courant de ralentissement associé à l'opérateur de diffusion apparaît donc fortement anisotrope. Son intensité augmente lorsque la vitesse des particules rapides approche la zone thermique. Qualitativement, la relaxation collisionnelle des produits de fusion énergétiques sur les ions thermiques cibles est donc caractérisée par :

- Une advection dans l'espace des vitesses à taux constant, correspondant à l'équation (4.8). Cet effet tend à accumuler les particules α dans la zone thermique de l'espace des vitesses.
- Une diffusion en vitesse très anisotrope, modélisée par l'expression (4.18), qui tend à isotropiser la fonction de distribution des produits de fusion lorsqu'ils se ralentissent et s'approchent de la zone de thermalisation.

5

Analyse asymptotique de l'opérateur de Fokker-Planck à deux échelles d'énergie

Sommaire

5.1	Motivation	181
5.2	Problème modèle	182
5.3	Mise à l'échelle des fonctions de distribution thermiques	183
5.4	Equation limite à l'échelle suprathermique	185
5.5	Equation limite à l'échelle thermique	187
5.5.1	Mise à l'échelle en vitesse	187
5.5.2	Changement d'échelle temporelle	188
5.6	Condition de couplage multi-échelle	188
5.7	Lien avec la stratégie numérique	189

5.1 Motivation

On se propose dans cette section de retrouver la technique multi-échelle mise au point au chapitre précédent pour modéliser finement le ralentissement et la thermalisation des particules suprathermiques en effectuant une analyse asymptotique du modèle de Fokker-Planck gouvernant l'évolution de la fonction de distribution associée aux particules α .

Pour ce faire, on reprend l'approche par développement asymptotique, notamment mise en œuvre sur l'équation de la chaleur dans la première partie du manuscrit, mais cette fois-ci appliquée à l'opérateur de Fokker-Planck.

Pour le problème considéré dans ce chapitre, le petit paramètre ε considéré par rapport auquel s'effectue le développement asymptotique correspond au rapport entre l'échelle de vitesse des particules thermiques et celle des ions surpathermiques. Les ions D et T du plasma de fusion évoluent en effet sur une gamme d'énergie de l'ordre du keV, tandis que les particules suprathermiques sont créées à des énergies de l'ordre du MeV, de sorte que $\varepsilon^2 \sim 10^{-3}$. En faisant tendre ε vers 0, on est susceptible de faire apparaître un modèle moyen et une forme de couplage entre les deux échelles de vitesse.

Pour simplifier l'analyse, nous considérons le problème du ralentissement des ions suprathermiques sur les ions thermiques seuls, sans prendre en compte la contribution électronique. Nous savons en effet qu'en dessous d'une certaine vitesse seuil (voir section 4.4 du chapitre 4), les particules α modérément suprathermiques ralentissent essentiellement sous l'effet des collisions avec les ions thermiques. C'est cette phase finale du ralentissement que l'on cherche ici à aborder sous l'angle de l'analyse asymptotique.

Les populations d'ions thermiques et suprathermiques évoluent donc sur des supports en vitesse bien distincts :

- les ions thermiques évoluent rapidement sur un support en vitesse très localisé au voisinage de l'origine,
- les ions suprathermiques balayent une plage de vitesse beaucoup plus importante avec une échelle de variation plus lente.

Ces populations définissent donc *deux échelles d'énergie* en interaction :

- Une échelle macroscopique, correspondant à l'échelle de vitesse des particules α suprathermiques.
- Une échelle microscopique, associée aux ions thermiques cibles et à la partie thermalisée de la fonction de distribution des α .

5.2 Problème modèle

Le processus de ralentissement des particules α caractérisées par la fonction de distribution $f(\vec{v}, t)$ est décrit par le modèle de type Fokker-Planck suivant :

$$\partial_t f = \text{div} \left(\nabla \mathcal{S}^{th} f - \nabla^2 \mathcal{T}^{th} \nabla f \right), \quad (5.1)$$

où \mathcal{S}^{th} et \mathcal{T}^{th} sont les potentiels de Rosenbluth associés à la fonction de distribution $g^{th}(\vec{v})$ des ions cibles thermiques. Les potentiels vérifient :

$$\begin{cases} \Delta \mathcal{S}^{th} = g^{th}, \\ \Delta \mathcal{T}^{th} = \mathcal{S}^{th}. \end{cases} \quad (5.2)$$

Remarque 5.2.1 Dans (5.1) ainsi que dans toute cette section, les opérateurs de dérivation $\text{div}(\cdot)$, $\nabla(\cdot)$ sont relatifs à la vitesse \vec{v} .

Développons la divergence en vitesse intervenant dans le membre de droite de (5.1) :

$$\partial_t f = \Delta \mathcal{S}^{th} f + \nabla \mathcal{S}^{th} \nabla f - \nabla^2 \mathcal{T}^{th} : \nabla^2 f - \nabla (\Delta \mathcal{T}^{th}) \nabla f.$$

L'équation de départ (5.1) se simplifie alors suivant :

$$\partial_t f = g^{th} f - \nabla^2 \mathcal{T}^{th} : \nabla^2 f. \quad (5.3)$$

5.3 Mise à l'échelle des fonctions de distribution thermiques

Du point de vue des particules suprathermiques, les cibles thermiques apparaissent très localisées dans l'espace des vitesses. Leur fonction de distribution varie très rapidement dans une petite zone de l'espace des vitesses proche de l'origine. Il est alors pertinent de mettre à l'échelle la fonction de distribution des cibles thermiques sous la forme suivante :

$$g^{th} = \frac{1}{\varepsilon^3} \rho_0\left(\frac{v}{\varepsilon}\right), \quad (5.4)$$

où $\rho_0(v)$ correspond à une distribution de Maxwell-Boltzmann de support en vitesse de taille 1. Autrement dit, on *dilate* le support en vitesse de la fonction de distribution des ions cibles g^{th} dont le support est initialement de taille $\mathcal{O}(\varepsilon)$. Cette mise à l'échelle définit la fonction de distribution ρ_0 évoluant sur un domaine en vitesse de taille $\mathcal{O}(1)$, correspondant à l'échelle macroscopique du problème. L'échelle macroscopique est ici associée à la composante suprathermique de la fonction de distribution des particules α . Notons que le facteur $\frac{1}{\varepsilon^3}$ introduit dans le membre de droite de (5.4) assure la conservation la densité de particules lorsque ε varie.

De même, on applique la mise à l'échelle (5.4) de manière cohérente aux potentiels de Rosenbluth associés aux cibles thermiques \mathcal{S}^{th} et \mathcal{T}^{th} :

$$\begin{cases} \mathcal{S}^{th}(v) = \frac{1}{\varepsilon} \mathcal{S}_0^{th}\left(\frac{v}{\varepsilon}\right) \\ \mathcal{T}^{th}(v) = \varepsilon \mathcal{T}_0^{th}\left(\frac{v}{\varepsilon}\right), \end{cases} \quad (5.5)$$

les potentiels renormalisés \mathcal{S}_0^{th} et \mathcal{T}_0^{th} évoluent sur un support en vitesse de taille $\mathcal{O}(1)$. Les renormalisations (5.5) s'obtiennent en effectuant le changement de variable $x \rightarrow \frac{x}{\varepsilon}$ dans la définition des potentiels (5.2).

Injectons alors la forme (5.4) pour la fonction de distribution des cibles thermiques ainsi que les renormalisations (5.5) des potentiels correspondants dans le modèle de ralentissement des particules suprathermiques (5.3). On obtient :

$$\partial_t f = \frac{1}{\varepsilon^3} \rho_0\left(\frac{v}{\varepsilon}\right) f - \frac{1}{\varepsilon} D^2 \mathcal{T}_0\left(\frac{v}{\varepsilon}\right) : D^2 f \quad (5.6)$$

Développons alors le produit doublement contracté $D^2 \mathcal{T}_0 : D^2 f$. Pour cela, on passe en coordonnées cartésiennes : le vecteur vitesse \vec{v} est représenté par ses trois composantes cartésiennes (v_1, v_2, v_3) telles que $v^2 = \sum_i v_i^2$. Les composantes cartésiennes du gradient en vitesse s'expriment alors de la façon suivante :

$$\partial_i \mathcal{T}_0 = \frac{v_i}{v} \partial_v \mathcal{T}_0(v).$$

De même le gradient en vitesse de la fonction de distribution est donné par les composantes :

$$\partial_i f = \frac{v_i}{v} \partial_v f(v).$$

On exprime ensuite les composantes de la matrice Hessienne. On a :

$$\partial_{ij}\mathcal{T}_0 = \left(\frac{\delta_{ij}}{v} - \frac{v_i v_j}{v^3} \right) \partial_v \mathcal{T}_0 + \frac{v_i v_j}{v^2} \partial_v^2 \mathcal{T}_0.$$

De même pour f :

$$\partial_{ij}f = \left(\frac{\delta_{ij}}{v} - \frac{v_i v_j}{v^3} \right) \partial_v f + \frac{v_i v_j}{v^2} \partial_v^2 f.$$

Le produit doublement contracté des deux Hessiennes est donc :

$$D^2\mathcal{T}_0 : D^2f = \sum_i \sum_j \left[\left(\frac{\delta_{ij}}{v} - \frac{v_i v_j}{v^3} \right) \partial_v \mathcal{T}_0 + \frac{v_i v_j}{v^2} \partial_v^2 \mathcal{T}_0 \right] \times \left[\left(\frac{\delta_{ij}}{v} - \frac{v_i v_j}{v^3} \right) \partial_v f + \frac{v_i v_j}{v^2} \partial_v^2 f \right]$$

En développant le produit, on arrive à :

$$\begin{aligned} D^2\mathcal{T}_0 : D^2f &= \sum_i \sum_j \left[\frac{1}{v^2} \left(\delta_{ij} - \frac{v_i v_j}{v^2} \right)^2 \partial_v f \partial_v \mathcal{T}_0 + \frac{1}{v} \left(\delta_{ij} - \frac{v_i v_j}{v^2} \right) \frac{v_i v_j}{v^2} (\partial_v f \partial_v^2 \mathcal{T}_0 + \partial_v^2 f \partial_v \mathcal{T}_0) \right. \\ &\quad \left. + \frac{v_i^2 v_j^2}{v^4} \partial_v^2 f \partial_v^2 \mathcal{T}_0 \right]. \end{aligned}$$

En insérant les relations suivantes :

$$\begin{cases} \sum_i \sum_j \delta_{ij} = \sum_{i=1}^3 1 = 3 \\ \sum_i \sum_j \frac{v_i v_j \delta_{ij}}{v^2} = \sum_{i=1}^3 \frac{v_i^2}{v^2} = 1 \\ \sum_i \sum_j \frac{v_i^2 v_j^2}{v^4} = 1, \end{cases} \quad (5.7)$$

dans l'équation précédente, on déduit :

$$D^2\mathcal{T}_0 : D^2f = \frac{1}{v^2} (3 - 2 + 1) \partial_v f \partial_v \mathcal{T}_0 + \frac{1}{v} (1 - 1) (\partial_v f \partial_v^2 \mathcal{T}_0 + \partial_v^2 f \partial_v \mathcal{T}_0) + \partial_v^2 f \partial_v^2 \mathcal{T}_0.$$

Ainsi, la fonction de distribution de particules suprathermiques évolue sous l'effet des collisions avec les ions cibles thermiques, conformément à l'équation de Fokker-Planck écrite sous la forme :

$$\partial_t f = \frac{1}{\varepsilon^3} \rho_0 \left(\frac{v}{\varepsilon} \right) f - \frac{2}{v^2} (\partial_v \mathcal{T}_0) \left(\frac{v}{\varepsilon} \right) \partial_v f - \frac{1}{\varepsilon} \partial_v^2 \mathcal{T}_0 \left(\frac{v}{\varepsilon} \right) \partial_v^2 f. \quad (5.8)$$

Les potentiels de Rosenbluth normalisés relatifs aux ions thermiques cibles $(\mathcal{S}_0, \mathcal{T}_0)$ vérifient le système couplé d'équations de Poisson dans l'espace des vitesses :

$$\begin{cases} \Delta \mathcal{T}_0 = \mathcal{S}_0 \\ \Delta \mathcal{S}_0 = \rho_0, \end{cases} \quad (5.9)$$

où ρ_0 est de support $\mathcal{O}(1)$.

5.4 Equation limite à l'échelle suprathermique

Dans cette section, on calcule la limite du membre droite de (5.8) pour des vitesses correspondant à l'échelle suprathermique et situées à l'extérieur du support de la distribution cible ρ_0 .

En se plaçant loin des cibles thermiques, la fonction de distribution cible ρ_0 apparaît très localisée autour de 0 :

$$\rho_0 \approx \delta_0, v \geq \varepsilon v_0, \quad (5.10)$$

cette approximation étant licite pour des vitesses suprathermiques supérieures à une certaine vitesse de référence v_0 grande devant le support des cibles ρ_0 .

Suivant l'approximation (5.10), le potentiel \mathcal{S}_0 peut se calculer explicitement :

$$\Delta \mathcal{S}_0 = \delta_0, \quad (5.11)$$

soit :

$$\mathcal{S}_0 = -\frac{1}{v},$$

où l'on a supposé pour simplifier l'analyse que la densité des particules cibles thermiques était 1.

En se plaçant toujours à l'extérieur du support des cibles ρ_0 , le second potentiel \mathcal{T}_0 , vérifie :

$$\Delta \mathcal{T}_0 = \mathcal{S}_0 = -\frac{1}{v} \quad (5.12)$$

En développant le Laplacien en coordonnées polaires, on a :

$$\frac{1}{v^2} \partial_v (v^2 \partial_v \mathcal{T}_0) = -\frac{1}{v}$$

Intégrant sur v , on arrive à :

$$v^2 \partial_v \mathcal{T}_0 = -\frac{v^2}{2} + C_0,$$

pour une constante C .

De là, on a :

$$\partial_v \mathcal{T}_0 = -\frac{1}{2} + \frac{C_0}{v^2}, \quad (5.13)$$

et en dérivant par rapport à v , on aboutit à l'expression suivante :

$$\partial_v^2 \mathcal{T}_0 = -\frac{2C_0}{v^3}.$$

Le troisième terme du membre droite de (5.8) s'exprime ainsi, dans la limite des grandes vitesses :

$$\frac{1}{\varepsilon} \partial_v^2 \mathcal{T}_0 \left(\frac{v}{\varepsilon} \right) \partial_v^2 f = -\varepsilon^2 \frac{2C_0}{v^3} \partial_v^2 f. \quad (5.14)$$

Pour le second terme du membre droite de (5.8), on a, en utilisant (5.13) :

$$\frac{2}{v^2} (\partial_v \mathcal{T}_0) \left(\frac{v}{\varepsilon} \right) \partial_v f = \frac{2}{v^2} \left(\frac{C_0 \varepsilon^2}{v^2} - \frac{1}{2} \right) \partial_v f = \left(-\frac{1}{v^2} + 2C_0 \frac{\varepsilon^2}{v^4} \right) \partial_v f. \quad (5.15)$$

En ne retenant que les termes dominants d'ordre $\mathcal{O}(\varepsilon^{-2})$ et $\mathcal{O}(1)$ dans le membre droite de (5.8), on montre ainsi que le ralentissement des particules suprathermiques est piloté par :

$$\partial_t f = \frac{1}{\varepsilon^2} \rho_0 \left(\frac{v}{\varepsilon} \right) f + \frac{1}{v^2} \partial_v f. \quad (5.16)$$

Le support de ρ_0 étant de taille 1, le terme en $\mathcal{O}(\varepsilon^{-2})$ disparaît du membre droite de (5.16) lorsque la vitesse devient grande. Le ralentissement de l'échelle suprathermique est alors modélisé par :

$$\partial_t f = \frac{1}{v^2} \partial_v f. \quad (5.17)$$

Cette description n'est valable que lorsque la vitesse v est suffisamment grande devant le support de la distribution cible, pour $v \geq \varepsilon V_\varepsilon$. En prenant pour ρ_0 une forme Maxwellienne, on peut donner une estimation de la coupure V_ε correspondant à la limite du domaine de validité de (5.17).

Fixons une valeur arbitrairement faible (mais positive) du petit paramètre ε . Par définition, V_ε est tel que pour $v \geq \varepsilon V_\varepsilon$, le terme $\frac{1}{\varepsilon^3} \rho_0 \left(\frac{v}{\varepsilon} \right)$ devient petit devant 1.

V_ε vérifie donc :

$$\frac{1}{\varepsilon^3} \exp(-V_\varepsilon^2) \ll 1$$

Ainsi, V_ε est donnée par :

$$V_\varepsilon \sim (\log \varepsilon)^2 \quad (5.18)$$

Ainsi, pour $v \geq \varepsilon V_\varepsilon$, V_ε étant donné par (5.18), le ralentissement suprathermique est bien décrit par (5.17).

Remarque 5.4.1 La forme (5.17) décrit une advection conservative dans l'espace des vitesses tant que $v \geq \varepsilon V_\varepsilon$. En effet, en intégrant (5.17) entre une vitesse v_0 et $v \rightarrow \infty$, où v_0 est une vitesse choisie contenant tout le support de la distribution suprathermique et grande devant $\varepsilon V_\varepsilon$, on obtient :

$$\frac{d}{dt} \left(\int_{v_0}^{\infty} f v^2 dv \right) = 0, \quad (5.19)$$

ce qui traduit la conservation du nombre de particules suprathermiques tant que $v \geq \varepsilon V_\varepsilon$. (On a supposé que f s'annule à l'infini.)

Notons que le ralentissement de la composante suprathermique n'est plus conservatif lorsque le support de la distribution atteint le domaine des vitesses inférieures à $\varepsilon V_\varepsilon$. On a alors :

$$\frac{d}{dt} \left(\int_0^\infty f v^2 dv \right) \sim -f(0). \quad (5.20)$$

Ce terme de perte, proportionnel à la valeur de la distribution suprathermique en 0 alimente une composante thermique évoluant sur la petite échelle d'énergie du problème, correspondant au domaine des vitesses thermiques. On retrouve ainsi la méthode à deux grilles de vitesses précédemment mise en place pour traiter le couplage entre la composante suprathermique et la partie thermique des particules α .

D'un point de vue plus qualitatif, la fonction de distribution suprathermique f solution de (5.17) est caractérisée par un profil en vitesse relativement plat sur tout le support de la fonction de distribution associée aux cibles thermiques, de sorte que :

$$f(v = 0, t) \sim f(v = \varepsilon V_\varepsilon, t), t > 0 \quad (5.21)$$

5.5 Equation limite à l'échelle thermique

5.5.1 Mise à l'échelle en vitesse

Lorsque la distribution suprathermique atteint la zone de l'espace des vitesses correspondant aux cibles, elle alimente une composante évoluant à l'échelle thermique, caractérisée par un support en vitesse très localisé autour de 0. Cette composante correspond à l'échelle "microscopique" du problème et est couplée à la grande échelle correspondant aux vitesses suprathermiques.

Pour décrire l'évolution de f à l'échelle thermique, on définit alors une composante thermique normalisée $f^{th}(v, t)$ reliée à f selon :

$$f^{th}\left(\frac{v}{\varepsilon}\right) = f(v). \quad (5.22)$$

Ici, on étudie la fonction de distribution des particules α f sur un petit support de taille $\mathcal{O}(\varepsilon)$, de sorte que f^{th} évolue sur un support de taille $\mathcal{O}(1)$. En d'autres termes, la mise à l'échelle en vitesse (5.22) traduit une dilatation du support localisé de la fonction de départ f et aboutit à une fonction f^{th} dont le support est $\mathcal{O}(1)$.

Le gradient en vitesse de la fonction de distribution à l'échelle thermique s'écrit alors :

$$\partial_v f = \frac{1}{\varepsilon} \partial_v f^{th}\left(\frac{v}{\varepsilon}\right),$$

et on a pour la dérivée seconde en vitesse :

$$\partial_v^2 f = \frac{1}{\varepsilon^2} \partial_v^2 f^{th}\left(\frac{v}{\varepsilon}\right).$$

En reprenant l'équation sur f , et compte tenu du lien entre f^{th} et f , on a :

$$\partial_t f(v) = \frac{1}{\varepsilon^3} \rho_0\left(\frac{v}{\varepsilon}\right) f^{th}\left(\frac{v}{\varepsilon}\right) - \frac{2}{v^2} (\partial_v \mathcal{T}_0)\left(\frac{v}{\varepsilon}\right) \frac{1}{\varepsilon} \partial_v f^{th}\left(\frac{v}{\varepsilon}\right) - \frac{1}{\varepsilon^3} \partial_v^2 \mathcal{T}_0\left(\frac{v}{\varepsilon}\right) \partial_v^2 f^{th}\left(\frac{v}{\varepsilon}\right).$$

En évaluant cette équation en $v = \varepsilon v'$, on arrive à :

$$\partial_t f(\varepsilon v') = \frac{1}{\varepsilon^3} \rho_0(v') - \frac{1}{\varepsilon^3} \frac{2}{v'^2} (\partial_v \mathcal{T}_0)(v') \partial_v f^{th}(v') - \frac{1}{\varepsilon^3} \partial_v^2 \mathcal{T}_0(v') \partial_v^2 f^{th}(v'). \quad (5.23)$$

5.5.2 Changement d'échelle temporelle

Pour pouvoir éliminer ε de l'équation (5.23), il s'avère nécessaire de changer d'échelle de temps, en plus du changement d'échelle en vitesse. On re-définit ainsi f^{th} de la façon suivante :

$$f^{th}\left(\frac{t}{\varepsilon^3}, \frac{v}{\varepsilon}\right) = f(t, v). \quad (5.24)$$

Ceci implique immédiatement que :

$$\partial_t f = \frac{1}{\varepsilon^3} \partial_t f^{th},$$

de sorte que l'équation sur la composante thermique f^{th} ne dépend plus de ε :

$$\partial_t f^{th} = \rho_0 f^{th} - \frac{2}{v^2} \partial_v \mathcal{T}_0 \partial_v f^{th} - \partial_v^2 \mathcal{T}_0 \partial_v^2 f^{th}. \quad (5.25)$$

Remarque 5.5.1 *La mise à l'échelle par rapport au temps signifie que la fonction de distribution thermique varie beaucoup plus rapidement que la composante suprathermique. Cela semble s'imposer du point de vue de l'analyse asymptotique afin de faire disparaître ε de l'équation limite sur l'échelle thermique. Aussi, d'un point de vue plus physique, cela peut s'interpréter par la dépendance en vitesse des temps de collision moyens caractérisant les dynamiques respectives des composantes thermiques et suprathermiques. Plus précisément, on peut montrer que le temps caractéristique τ_{ab} d'une collision entre deux ions (éventuellement d'espèces différentes) peut s'estimer par [13] :*

$$\tau_{ab} \sim \frac{m_a^2 v_r^3}{4\pi e^4 Z_a^2 Z_b^2 n_b \log \Gamma_{ab}}, \quad (5.26)$$

l'ion a étant la particule test qui se ralentit sur la particule cible b. Dans l'expression 5.26, v_r désigne la vitesse relative entre les deux ions.

Les temps caractéristiques d'évolution τ^{th} (resp. τ^{ST}) des composantes thermique (resp. suprathermique) sont donc dans un rapport :

$$\frac{\tau^{th}}{\tau^{ST}} \sim \left(\frac{v^{ST}}{v^{th}} \right)^3 \sim \varepsilon^3, \quad (5.27)$$

ce qui est cohérent avec la mise à l'échelle (5.24).

Remarque 5.5.2 *L'équation limite est indépendante de la composante suprathermique. En fait, le couplage entre les deux échelles de vitesse apparaît au niveau de la condition limite associée à la fonction de distribution thermique au bord du support en $v = V_\varepsilon$.*

5.6 Condition de couplage multi-échelle

Pour déterminer complètement l'évolution de la composante thermique, il est nécessaire d'imposer une condition limite sur le bord du domaine thermique, c'est à dire en $v = \varepsilon V_\varepsilon$. Ceci traduit le *couplage* entre les deux échelles du problème au niveau du modèle

limite : la valeur au bord du domaine thermique pour f^{th} étant donnée par la valeur en 0 de la composante suprathermique f^{ST} , solution de (5.17). La condition limite sur f^{th} s'écrit ainsi :

$$f^{th}\left(\frac{t}{\varepsilon^3}, V_\varepsilon\right) = f^{ST}(t, 0), \quad (5.28)$$

la fonction de distribution suprathermique étant relativement homogène sur tout le support thermique.

5.7 Lien avec la stratégie numérique

On retrouve par une analyse asymptotique la technique multi-échelle donnée par le système (4.12) établi dans la section 4.5.2. Cette méthode permet de résoudre efficacement le ralentissement des particules rapides sur une fonction distribution cible caractérisée par une largeur en vitesse beaucoup plus faible. Les deux échelles sont traitées *conjointement* par des modélisations différentes, et sont liées par une condition de *couplage*, correspondant ici à une alimentation de l'échelle microscopique par l'échelle macroscopique.

On exploite ainsi le caractère multi-échelle du problème pour répartir au mieux l'effort de discrétisation de façon adaptée aux échelles de variation de chaque composante à résoudre.

La stratégie numérique élaborée aux chapitres précédents initialement issue d'une réécriture des termes de l'équation de Fokker-Planck se retrouve ici confirmée de manière plus rigoureuse par une analyse asymptotique.

Remarque 5.7.1 *Dans la résolution numérique du problème à deux échelles de vitesse, on re-distribue la condition au bord (5.28) sous la forme d'un terme source dans le volume au sein du support thermique, traduisant l'alimentation de l'échelle thermique (correspondant à l'échelle microscopique du problème) par l'échelle suprathermique (l'échelle macroscopique). Le terme source est proportionnel à $f^{ST}(0)$ et l'approximation est raisonnable tant que la fonction de distribution suprathermique reste homogène sur le support thermique. Dans la pratique, l'évolution couplée des composantes thermique/suprathermique est calculée en résolvant le système :*

$$\begin{cases} (\partial_t f_\alpha^{ST})_{\alpha\beta} = 4\pi\Gamma_{\alpha\beta}\partial_{\vec{v}} \cdot \left(f_\alpha^{ST} \underbrace{\frac{\partial_{\vec{v}} \mathcal{S}_\beta}{\frac{n_\beta}{4\pi v^2} \mathbf{e}_r^v}}_{n_\beta \delta_0(\vec{v})} \right) - 4\pi\Gamma_{\alpha\beta} f_\alpha^{ST} \underbrace{f_\beta^T}_{n_\beta \delta_0(\vec{v})} \\ (\partial_t f_\alpha^T)_{\alpha\beta} = 4\pi\Gamma_{\alpha\beta}\partial_{\vec{v}} \cdot (f_\alpha^T \partial_{\vec{v}} \mathcal{S}_\beta) + 4\pi\Gamma_{\alpha\beta} f_\alpha^{ST}(0) f_\beta^T. \end{cases} \quad (5.29)$$

6

Mise en œuvre numérique : le code cinétique FUSE

Sommaire

6.1	Introduction	192
6.2	Co-existence de deux maillages en vitesse	192
6.3	Collisions à l'échelle thermique	194
6.3.1	Principe de la méthode numérique	194
6.3.2	Développement multipolaire des potentiels de Rosenbluth . . .	196
6.3.3	Discrétisation conservative de l'opérateur de Fokker-Planck . .	198
6.3.4	Traitement de la non-linéarité - méthode ADI	199
6.3.5	Potentiels de Rosenbluth électroniques	202
6.3.6	Calcul des potentiels de Rosenbluth résiduels : équation de Poisson	202
6.3.7	Optimisation du schéma numérique des collisions à l'échelle thermique	203
6.4	Advection de la composante thermique	204
6.4.1	Réalisation de l'advection en coordonnées sphériques	205
6.4.2	Implémentation numérique	206
6.4.3	Conditions initiale et aux limites pour l'advection	207
6.5	Accélération de la composante thermique	207
6.6	Choix du maillage	208
6.6.1	Maillage spatial	208
6.6.2	Maillage en vitesse pour la grille thermique	209
6.6.3	Adaptation dynamique du maillage en vitesse	210
6.7	Collisions à l'échelle suprathermique	210
6.7.1	Discrétisation de l'opérateur de Fokker-Planck	211
6.7.2	L'algorithme LSE (Locally Sub-cycled Explicit)	213
6.8	Advection de la composante suprathermique	217
6.9	Accélération de la composante suprathermique	220
6.10	Couplage multi-échelle thermique-suprathermique	220

6.10.1	Du point de vue des particules rapides	220
6.10.2	Du point de vue de la composante thermique	221
6.11	Traitement des électrons	223
6.11.1	Convection des électrons	223
6.11.2	Travail des forces de pression et des forces électriques	223
6.11.3	Conduction thermique électronique	224
6.11.4	Autres mécanismes	225
6.12	Synthèse des algorithmes du code cinétique FUSE	225
6.13	Complexité algorithmique du code FUSE	226
6.14	Validation du code FUSE sur quelques problèmes test de type FCI	228
6.14.1	Ralentissement isotrope	228
6.14.2	Relaxation anisotrope et instationnaire	229
6.14.3	Conservation de l'énergie et répartition du dépôt	231

6.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous présentons en détail les algorithmes originaux qui ont été développés en vue de modéliser les particules énergétiques produites par réactions de fusion suivant une approche cinétique. On expose en particulier les méthodes de résolution de la phase de transport, d'accélération et de relaxation collisionnelle des particules α (composante suprathermique). En s'appuyant sur l'analyse multi-échelle du problème, nous montrons comment coupler au niveau numérique les deux échelles de vitesse du problème : l'échelle thermique correspondant aux ions D,T et l'échelle suprathermique propre aux particules α . Cette stratégie assure une modélisation fine du processus de thermalisation des particules α . Les méthodes numériques relatives aux particules thermiques sont reprises du code FPION [50]. Par souci d'exhaustivité, nous décrivons leur principe et montrons comment elles se couplent aux techniques de résolution propres à l'échelle suprathermique. Le formalisme à deux composantes issu de l'analyse multi-échelle conduit à une refonte totale du code cinétique, chaque fonction de distribution étant désormais représentée par un "objet C++" possédant entre autres deux composantes en vitesse, chacune évoluant sur des maillages en vitesse différents. Le code a ainsi évolué, pour devenir le code FUSE, comme *Fpion Update with two Scales of Energy*. Le caractère orienté objet du langage C++ est particulièrement bien adapté pour traiter ce type de structures composées. Le code FUSE est désormais capable de traiter les réactions de fusion au niveau cinétique, et est donc un outil potentiellement riche pour étudier finement les mécanismes de combustion associés au fonctionnement des cibles de FCI.

Ce chapitre reprend une partie de la publication [P3].

6.2 Co-existence de deux maillages en vitesse

Le caractère bimodal de la fonction de distribution des α , caractérisée par deux échelles de vitesse, conduit naturellement à la co-existence de deux maillages en vitesse, chacun ayant une résolution adaptée à l'échelle de vitesse à traiter. Plus précisément, on définit :

- Un maillage dit suprathermique, conçu pour simuler l'évolution en vitesse de la composante suprathermique f_α^{ST} . Le maillage s'étend sur un vaste domaine en vitesse, contenant en particulier la vitesse de création des particules rapides $v \simeq v_h \simeq 1.3 \times 10^9$ cm/s correspondant à l'énergie 3.52 MeV. Aussi, comme la composante suprathermique varie sur une échelle de variation v_α^{ST} relativement grande devant l'échelle thermique, il n'est pas nécessaire de mailler très finement cette grille. Il faut toutefois s'assurer que la résolution choisie permette de résoudre les structures dessinées dans l'espace des vitesses par la composante suprathermique f_α^{ST} avec une précision suffisante. Ce choix de résolution est indépendant de la température locale des cibles thermiques, et ne dépend que de l'échelle de variation v_α^{ST} intrinsèque à la composante suprathermique. En pratique, on observe qu'un choix de pas en vitesse de l'ordre de l'échelle thermique v_i^{th} assure une description suffisamment détaillée des variations de f_α^{ST} sur l'ensemble du domaine en vitesse suprathermique (voir en particulier section 7.8 du chapitre 7, par exemple Fig. 7.20).
- Une grille en vitesse dite thermique, sur laquelle la composante thermique f_α^T évolue. Ce maillage permet de capturer des variations fines mais localisées sur une zone de l'espace des vitesses correspondant au support de la fonction de distribution des ions cibles thermiques. Le pas en maillage doit donc être significativement plus petit que l'échelle thermique v_i^{th} . Il est ainsi possible de modéliser finement l'interaction entre la composante thermique des particules α et les fonctions de distribution des ions thermiques D-T, aboutissant à la thermalisation complète du système.

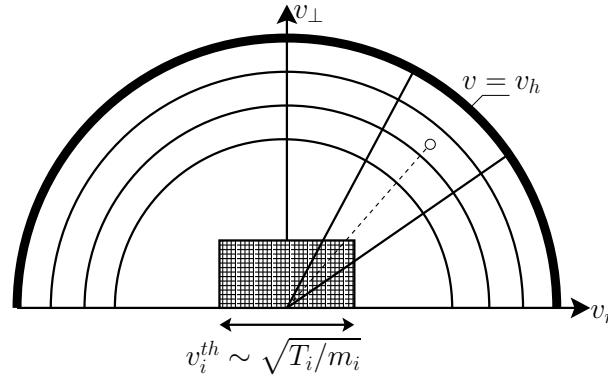


FIGURE 6.1 – Représentation des deux maillages en vitesse pour modéliser les deux composantes de la fonction de distribution des particules α .

La composante suprathermique évolue sur la grille polaire (v, θ) maillée plus grossièrement, mais couvrant un domaine étendu de l'espace des énergies, s'étalant jusqu'à plusieurs MeV. La fine coquille d'épaisseur $\sim T_i$ représentée sur la figure correspond au terme source associé aux réactions de fusion. La composante thermique est discrétisée sur la petite grille en vitesse paramétrée en coordonnées cylindriques (v_r, v_\perp) . Cette grille est associée à un pas en vitesse plus fin, adapté à la résolution de l'échelle de vitesse thermique. Les deux grilles sont centrés sur la vitesse moyenne locale $V_0 \sim V_e \sim V_i$. Dans le problème considéré, l'espace des vitesses est caractérisé par une symétrie axiale autour de l'axe \vec{v}_r .

Les deux maillages en vitesse sont représentés sur la Fig. 6.1. Ils sont tous deux centrés sur la vitesse moyenne du plasma $V_0(r)$, également proche de la vitesse moyenne électronique $V_e(r)$. Cette technique de résolution multi-échelle est par essence plus efficace qu'une approche directe du problème consistant à mailler tout le domaine en vitesse avec une précision uniforme correspondant à l'échelle thermique. Nous montrerons que cette approche permet de simuler au niveau cinétique la combustion des configurations réalistes de type FCI sans engendrer de temps calculs prohibitifs.

En vue de modéliser au niveau cinétique le fonctionnement de la cible de DT, il s'agit ainsi de résoudre un ensemble de trois équations cinétiques pour l'échelle thermique, chacune correspondant à une espèce ionique parmi D, T, α (composante thermalisée), couplée à une équation cinétique pour l'évolution de la composante suprathermique de l'espèce α . La composante suprathermique est peuplée par le terme source des réactions de fusion calculé à partir des fonctions de distribution f_D et f_T . La densité et la vitesse électroniques sont déduites des conditions d'électro-neutralité. Ces dernières s'écrivent, en tenant naturellement compte la composante suprathermique :

$$n_e = \sum_i Z_i n_i + Z_\alpha n_\alpha^{ST}, \quad \vec{V}_e = \frac{1}{n_e} \left(\sum_i Z_i n_i \vec{V}_i + Z_\alpha n_\alpha^{ST} V_\alpha^{ST} \right), \quad (6.1)$$

la température électronique étant obtenue par résolution de l'équation d'énergie.

Pour des raisons numériques, l'ensemble de ces équations cinétiques est écrit sous une forme adimensionnée, basée sur le système d'unités défini dans le tableau 3.1.

La méthode générale de résolution des équations cinétiques de Vlasov-Fokker-Planck suit une approche par splitting, consistant à traiter séparément les phases de transport, d'accélération et de collisions.

Nous détaillons dans la suite chacune de ces étapes, et ce, pour les deux composantes en vitesse.

Nous commençons par décrire les méthodes de résolution associées à l'échelle thermique, avant de présenter les techniques de résolution pour la composante suprathermique et la mise en œuvre numérique du couplage entre les deux échelles.

6.3 Collisions à l'échelle thermique

6.3.1 Principe de la méthode numérique

Dans l'équation cinétique appliquée aux ions thermiques, on choisit de calculer les termes de ralentissement au moyen des potentiels de Rosenbluth (voir section 3.6 du chapitre 3, en particulier Eq. (3.29)). Ces potentiels sont obtenus par résolution d'un ensemble d'équations de Poisson couplées dans l'espace des vitesses thermiques. L'utilisation de cette formulation présente un certain avantage numérique par rapport à celle basée sur les expressions intégrales de Landau. En effet, considérons une fonction de distribution (composante thermique) sur le maillage thermique bi-dimensionnel, comportant n_x points dans la direction longitudinale, et n_\perp dans la direction transverse (rappelons que dans le cas traité, on a une symétrie azimutale autour de la direction longitudinale). Evaluons le

nombre d'opérations élémentaires à effectuer pour calculer le terme de collision suivant chacune des deux méthodes.

- Un calcul direct des intégrales de la formulation de Landau implique $\mathcal{O}(n_x * n_\perp)$ opérations en chacun des $n_x * n_\perp$ points de l'espace des vitesses thermiques, soit au total $\mathcal{O}(n_x^2 * n_\perp^2)$ opérations.

- Une méthode basée sur la formulation employant les potentiels de Rosenbluth implique tout d'abord l'inversion de laplaciens par une méthode "FFT" pour transformer le second membre de l'équation de Poisson en une série de sinus suivant la direction longitudinale (voir section 6.3.6). Cette première étape est suivie de l'inversion d'une matrice selon la direction v_\perp en chaque point de l'axe longitudinal. Ceci requiert au total $\mathcal{O}(n_x * n_\perp * \text{Log} n_x)$ opérations.

L'approche consistant à résoudre les équations de Poisson permet donc de gagner un facteur $\mathcal{O}(n_x * n_\perp / \text{Log} n_x)$ sur la complexité algorithmique de la phase de résolution des collisions pour l'échelle thermique.

Remarque 6.3.1 *La paramétrisation cylindrique retenue pour l'espace des vitesses thermiques garantit une répartition homogène du pas de discrétisation, sans préjuger d'une forme particulière pour la fonction de distribution. Ceci permet de garder une certaine généralité dans le domaine d'application du code, en particulier si l'on souhaite traiter des cas où les fonctions de distribution s'écartent significativement d'une forme de Maxwellienne (voir Fig.6.2). Ceci peut par exemple se produire dans les fronts d'onde de choc où l'on voit apparaître des distributions ioniques très éloignées de l'équilibre, montrant localement des structures à deux faisceaux [18].*

En outre, les fonctions de distribution pouvant présenter de fortes anisotropies que l'on ne peut caractériser a priori, on ne peut suivre une approche par développement en polynômes de Legendre comme on le fait pour la fonction de distribution électronique. Cette dernière est en effet caractérisée par une vitesse thermique beaucoup plus grande que l'échelle de vitesse thermique ionique, elle-même proche de l'échelle de vitesse hydrodynamique.

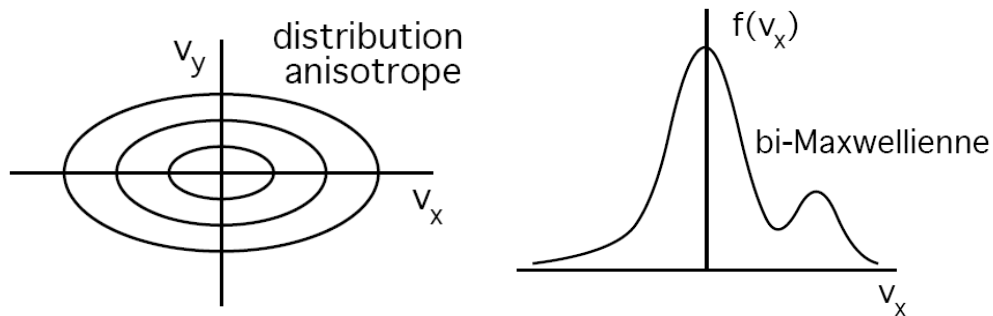


FIGURE 6.2 – Exemples de fonction de distribution non-Maxwellienne que l'on souhaite pouvoir traiter dans le code cinétique.

Par ailleurs, il est avantageux pour la résolution numérique des équations de Poisson d'avoir des conditions aux limites de Dirichlet nulles (une résolution numérique dans le

cas général est possible mais plus coûteuse [39]). Or, les potentiels de Rosenbluth, ne s'annulent pas sur la frontière du domaine de calcul, comme le montrent leur comportement asymptotique respectif (voir Fig. 6.3), lorsque $v \rightarrow \infty$:

$$\mathcal{S}_i \sim -\frac{n_i}{4\pi\|\vec{v} - \vec{v}_i\|} \quad \mathcal{T}_i \sim -\frac{n_i}{8\pi}\|\vec{v} - \vec{v}_i\|. \quad (6.2)$$

On cherche donc à se ramener à des conditions aux limites nulles en décomposant la fonction de distribution f (propre à l'échelle thermique) sous la forme d'une somme entre une partie dite "explicite" f_M pour laquelle on sait calculer analytiquement les potentiels de Rosenbluth associés \mathcal{S}_M et \mathcal{T}_M , et une partie résiduelle $f_r = f - f_M$ pour laquelle on résout numériquement les équations de Poisson. Les équations à résoudre sur les potentiels de Rosenbluth résiduels sont $\Delta\mathcal{S}_r = f_r$ et $\Delta\mathcal{T}_r = S_r$, mais cette fois, avec des conditions aux limites de Dirichlet nulles. Il reste finalement à assembler les deux contributions pour obtenir les potentiels complets : $\mathcal{S} = \mathcal{S}_r + \mathcal{S}_M$ et $\mathcal{T} = \mathcal{T}_r + \mathcal{T}_M$.

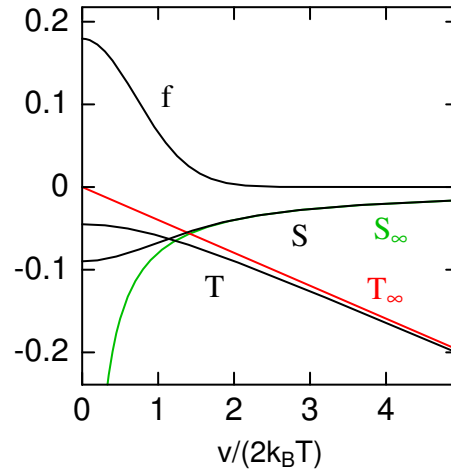


FIGURE 6.3 – Comportement asymptotique des potentiels de Rosenbluth.

Pour une fonction de distribution f Maxwellienne, on peut calculer analytiquement les potentiels de Rosenbluth (voir Annexe C) \mathcal{S} et \mathcal{T} représentées en noir. Le comportement asymptotique des potentiels est représenté en couleur : en rouge pour \mathcal{T} , en vert pour \mathcal{S} .

6.3.2 Développement multipolaire des potentiels de Rosenbluth

Les parties explicites de \mathcal{S} et de \mathcal{T} doivent être choisies de manière à absorber la plus grande dépendance en vitesse possible.

Il faut aussi que la partie explicite soit calculable analytiquement.

Pour choisir une partie explicite pertinente pour le problème à résoudre, on s'appuie sur le développement de la fonction de distribution f et des potentiels de Rosenbluth associés \mathcal{S} et \mathcal{T} en polynômes de Legendre :

$$f(\vec{v}) = \sum_n f_n(v) P_n\left(\frac{v_x}{v}\right), \quad (6.3)$$

où l'on adopte la condition de normalisation suivante :

$$\langle P_n, P_m \rangle = \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} P_n(\mu) P_m(\mu) d\mu = \frac{\delta_{nm}}{2n+1}.$$

Remarque 6.3.2 En introduisant les variables polaires $v = \sqrt{v_x^2 + v_\perp^2}$ et $\mu = \cos \theta$, θ étant l'angle polaire entre la direction \vec{v} et l'axe de symétrie azimutale, le Laplacien d'une fonction $f(v, \mu)$ peut s'écrire sous la forme générale suivante :

$$\Delta f = \frac{1}{v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left(v^2 \frac{\partial f}{\partial v} \right) + \frac{\partial}{\partial \mu} \left((1 - \mu^2) \frac{\partial f}{\partial \mu} \right).$$

On a ainsi une séparation des variables entre v et μ , de sorte que l'on peut représenter f et son Laplacien sous la forme une somme de termes qui sont des produits d'une fonction de v par une fonction de μ . De là la pertinence de l'approche par développement en polynômes de Legendre sur la partie en vitesse.

Les potentiels associés sont développés de la même façon :

$$\mathcal{S}(\vec{v}) = \sum_n S_n(v) P_n\left(\frac{v_x}{v}\right) \quad \mathcal{T}(\vec{v}) = \sum_n T_n(v) P_n\left(\frac{v_x}{v}\right). \quad (6.4)$$

Compte tenu des relations liant f et les potentiels, les fonctions radiales $S_n(v)$ et $T_n(v)$ vérifient respectivement :

$$S_n(v) = -v^n \int_v^\infty \frac{f_n}{(2n+1)v^{n-1}} dv - \frac{1}{v^{n+1}} \int_0^v \frac{v^{n+2}}{2n+1} f_n(v) dv,$$

et

$$T_n(v) = -v^n \int_v^\infty \frac{S_n}{(2n+1)v^{n-1}} dv - \frac{1}{v^{n+1}} \int_0^v \frac{v^{n+2}}{2n+1} S_n(v) dv.$$

On s'intéresse au comportement des potentiels à grande vitesse. Les termes radiaux associés à la fonction de distribution sont supposés décroître suffisamment vite à l'infini, de sorte que :

$$S_n(v) \underset{v \rightarrow \infty}{\sim} -\frac{1}{v^{n+1}} \int_0^\infty \frac{v^{n+2}}{2n+1} f_n(v) dv = -\frac{M_n^n}{4\pi(2n+1)v^{n+1}},$$

où l'on définit le moment particulier associé à la fonction de distribution :

$$M_i^j = (2i+1) \int v^j P_i\left(\frac{v_x}{v}\right) f(\vec{v}) d^3v.$$

En injectant les relations obtenues sur S_n dans la définition des fonctions radiales $T_n(v)$, et en prenant la limite à grande vitesse, on arrive à :

$$T_n(v) \underset{v \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{8\pi(2n+1)} \left(\frac{M_n^n}{(2n-1)v^{n-1}} - \frac{M_n^{n+2}}{(2n+3)v^{n+1}} \right).$$

Ainsi, la partie de \mathcal{T} qui décroît comme $1/v^{n-1}$ est donnée par :

$$T_n(v, \mu) \underset{v \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{8\pi(2n-1)v^{n-1}} \left(\frac{M_n^n}{2n+1} P_n(\mu) - \frac{M_{n-2}^n}{2n-3} P_{n-2}(\mu) \right).$$

Les termes successifs du développement précédent peuvent s'exprimer en fonction des moments particuliers de f d'ordre croissant. Ces moments sont eux-mêmes reliés aux grandeurs physiques que l'on étudie (densité, vitesse, température, flux de chaleur, etc...). Si l'on soustrait à f une contribution dite explicite f_M ayant les mêmes moments que la fonction de distribution complète f , et ce jusqu'à un certain ordre n , alors les parties résiduelles de la fonction de distribution et des potentiels de Rosenbluth seront caractérisées par une décroissance rapide à l'infini. Plus précisément, on a :

$$\mathcal{S} - \mathcal{S}_M \underset{v \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{v^{n+2}} \quad \mathcal{T} - \mathcal{T}_M \underset{v \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{v^n}$$

si la partie explicite de la distribution f_M possède les mêmes moments que la fonction de distribution totale f jusqu'à l'ordre n , c'est à dire que :

$$M_i^j(f) = M_i^j(f_M), \text{ pour } 0 \leq j \leq n, i = j \text{ et } i = j - 2. \quad (6.5)$$

Dans la pratique, on choisit une forme explicite f_M qui s'appuie sur la Maxwellienne locale. Le détail des calculs relatifs à la contribution explicite de la fonction de distribution thermique et des potentiels de Rosenbluth associés est donné dans l'Annexe A.

6.3.3 Discrétisation conservative de l'opérateur de Fokker-Planck

L'opérateur de Fokker-Planck prend la forme d'une divergence dans l'espace des vitesses. On peut alors traduire naturellement le caractère conservatif de l'opérateur au niveau du schéma numérique, en suivant une approche par différences finies. En reprenant l'opérateur de Fokker-Planck (3.29) propre à l'échelle thermique, et en l'explicitant en coordonnées cylindriques¹⁴, on a, en tenant compte de la symétrie de révolution du problème :

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\partial J_x}{\partial v_x} - \frac{1}{v_\perp} \frac{\partial}{\partial v_\perp} (v_\perp J_\perp),$$

où le courant de ralentissement \vec{J} s'exprime en coordonnées cylindriques suivant :

$$\begin{aligned} J_x &= -f \frac{\partial S}{\partial v_x} + \frac{\partial f_i}{\partial v_x} \frac{\partial^2 T}{\partial v_x^2} + \frac{\partial f_i}{\partial v_\perp} \frac{\partial^2 T}{\partial v_x \partial v_\perp}, \\ J_\perp &= -f \frac{\partial S}{\partial v_\perp} + \frac{\partial f_i}{\partial v_x} \frac{\partial^2 T}{\partial v_x \partial v_\perp} + \frac{\partial f_i}{\partial v_\perp} \frac{\partial^2 T}{\partial v_\perp^2}. \end{aligned}$$

On discrétise alors les dérivées en vitesse du courant de ralentissement de façon conservative :

$$\left(\frac{\partial f_i}{\partial t} \right)_{j,k} = \frac{J_{xj-\frac{1}{2},k} - J_{xj+\frac{1}{2},k}}{\delta v_x} + \frac{1}{v_{\perp k}} \frac{v_{\perp k-\frac{1}{2}} J_{\perp j,k-\frac{1}{2}} - v_{\perp k+\frac{1}{2}} J_{\perp j,k+\frac{1}{2}}}{\delta v_\perp}.$$

14. Rappelons que la composante thermique est discrétisée sur un maillage en vitesse paramétrée en coordonnées cylindriques (v_x, v_\perp) , tandis que la composante suprathermique est exprimée en coordonnées polaires (v, μ)

Les courants de ralentissement entre les points de grille sont discrétisés de façon centrée :

$$\begin{aligned}
 J_{xj+\frac{1}{2},k} &= -\frac{f_{j+1,k} + f_{j,k}}{2} \left(\frac{\partial S}{\partial v_x} \right)_{j+\frac{1}{2},k} + \frac{f_{j+1,k} - f_{j,k}}{\delta v_x} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial v_x^2} \right)_{j+\frac{1}{2},k} \\
 &\quad + \frac{f_{\alpha j+1,k+1} + f_{j,k+1} - f_{\alpha j+1,k-1} - f_{j,k-1}}{4\delta v_\perp} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial v_x \partial v_\perp} \right)_{j+\frac{1}{2},k}, \\
 J_{\perp j,k+\frac{1}{2}} &= -\frac{f_{j,k+1} + f_{j,k}}{2} \left(\frac{\partial S}{\partial v_\perp} \right)_{j,k+\frac{1}{2}} + \frac{f_{\alpha j,k+1} - f_{j,k}}{\delta v_\perp} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial v_\perp^2} \right)_{j,k+\frac{1}{2}} \\
 &\quad + \frac{f_{j+1,k+1} + f_{j+1,k} - f_{j-1,k+1} - f_{j-1,k}}{4\delta v_x} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial v_x \partial v_\perp} \right)_{j,k+\frac{1}{2}}.
 \end{aligned}$$

Les dérivées des potentiels nécessaires sont elles-mêmes obtenues de la façon la plus directe par différences et moyennes centrées.

Le schéma complet discrétisé en vitesse se met finalement sous la forme :

$$\begin{aligned}
 \frac{\delta t}{2} \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{j,k} &= \alpha s_{j,k} f_{j+1,k} + \alpha p_{j,k} f_{j,k} + \alpha i_{j,k} f_{j-1,k} \\
 &\quad + \beta s_{j,k} f_{j,k+1} + \beta p_{j,k} f_{j,k} + \beta i_{j,k} f_{j,k-1} \\
 &\quad + \sigma_{j,k},
 \end{aligned} \tag{6.6}$$

où les indices j et k prennent toutes les valeurs correspondant aux points intérieurs du domaine des vitesses thermiques :

$$1 \leq j \leq j_{\max} - 2 \quad \text{et} \quad 1 \leq k \leq k_{\max} - 1.$$

Les conditions aux limites associées sont :

- $f = 0$ pour $v_\perp = v_{\perp \max}$
- $f = 0$ pour $v_x = v_{x \max}$ et $v_x = -v_{x \max}$
- condition de symétrie sur l'axe $v_\perp = 0$, $\frac{\partial f}{\partial v_\perp} = 0$

Nous renvoyons à l'Annexe B pour l'expression des termes de l'équation de Fokker-Planck discrétisée (6.6).

6.3.4 Traitement de la non-linéarité - méthode ADI

Dans l'opérateur de Fokker-Planck appliqué à la fonction de distribution f (composante thermique), les termes de friction dynamique (liés au gradient du premier potentiel \mathcal{S}) et la matrice de diffusion (liée à la Hessienne du second potentiel \mathcal{T}) dépendent eux-mêmes de la fonction distribution f : le problème est *non-linéaire*. Une stratégie très générale pour le traitement de la non-linéarité est d'effectuer une résolution par itérations successives où les dérivées des potentiels de Rosenbluth (correspondant aux coefficients B et C définis par (B.3)) sont évalués à un temps intermédiaire $t + \frac{\delta t}{2}$, de manière à ce que le schéma global soit centré en temps. En outre, les facteurs impliquant la fonction de distribution ou ses dérivées sont représentés par la moyenne de leur valeur au temps t et $t + \frac{\delta t}{2}$ (schéma de type Cranck-Nicholson).

Pour la discrétisation temporelle de l'opérateur de collisions, on met en place une approche de type implicite à directions alternées (ADI, comme "Alternate Direction Implicit"). L'opérateur de Fokker Planck revient en effet à une équation d'advection/diffusion (en vitesse) bi-dimensionnelle pouvant s'écrire selon la forme générale :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + D_{\parallel} f + D_{\perp} f = G$$

où les opérateurs différentiels D_{\parallel} (resp. D_{\perp}) mettent en jeu les dérivées partielles de f par rapport à v_x (resp. v_{\perp}) jusqu'à l'ordre 2. La méthode ADI consiste à décomposer la résolution numérique en deux étapes successives dans chacune desquelles on utilise un schéma implicite suivant une des deux directions - v_x ou v_{\perp} - l'autre direction étant traitée de manière explicite. Ceci permet de réduire la résolution numérique à l'inversion de deux matrices tri-diagonales. L'application de la méthode ADI au problème non-linéaire que l'on a à résoudre se traduit ainsi par l'algorithme itératif suivant :

- **Etat initial**

Au départ, on connaît la valeur f^j de f au temps $t_j = j\delta t$. Cela permet de calculer les coefficients des opérateurs D_{\parallel} , D_{\perp} , et G (impliquant les dérivées croisées des potentiels et la valeur de f) au temps t_j .

- **Première itération – Inversion en v_x**

On résout d'abord le premier système tri-diagonal, correspondant à l'inversion suivant la direction longitudinale v_x :

$$\frac{f^{*j+1/2} - f^j}{\delta t/2} + D_{\parallel}^j f^{*j+1/2} + D_{\perp}^j f^j = G^j \quad (6.7)$$

Cela définit la valeur $f^{*j+1/2}$ de f au temps intermédiaire. La matrice tri-diagonale à inverser est formée par la diagonale principale correspondant aux coefficients α_p et des deux sous-diagonales inférieure (resp. supérieure) correspondant aux coefficients α_i (resp. α_s).

- **Première itération – Inversion en v_{\perp}**

A partir de la valeur $f^{*j+1/2}$, on effectue l'inversion suivant la direction perpendiculaire v_{\perp} :

$$\frac{f^{*j+1} - f^{*j+1/2}}{\delta t/2} + D_{\parallel}^j f^{*j+1/2} + D_{\perp}^j f^{*j+1} = G^j \quad (6.8)$$

cette étape définissant f^{*j+1} .

- **Evaluation des opérateurs au temps intermédiaire**

A partir de f^{*j+1} , on calcule les coefficients des opérateurs différentiels au temps intermédiaire $t + \frac{\delta t}{2}$, dans lesquels la valeur de la fonction de distribution est prise égale à la moyenne entre sa valeur au début du pas de temps f^j et sa valeur estimée à la fin du

pas de temps $f^{\star j+1}$:

$$D_{\parallel}^{j+1/2} = D_{\parallel} \left(\frac{f^j + f^{\star j+1}}{2} \right) \quad (6.9)$$

$$D_{\perp}^{j+1/2} = D_{\perp} \left(\frac{f^j + f^{\star j+1}}{2} \right) \quad (6.10)$$

$$G^{j+1/2} = G \left(\frac{f^j + f^{\star j+1}}{2} \right) \quad (6.11)$$

$$(6.12)$$

• **Deuxième itération** – *Inversion en v_x*

On recommence la première étape correspondant à l'inversion suivant la direction longitudinale v_x , en repartant de la valeur initiale f^j , mais cette fois, avec la valeur des opérateurs pris au temps intermédiaire :

$$\frac{f^{\star j+1/2} - f^j}{\delta t/2} + D_{\parallel}^{j+1/2} f^{\star j+1/2} + D_{\perp}^{j+1/2} f^j = G^{j+1/2} \quad (6.13)$$

Cela met à jour la valeur de $f^{\star j+1/2}$.

• **Deuxième itération** – *Inversion en v_{\perp}*

On reprend l'inversion suivant la direction perpendiculaire, en partant de la dernière valeur de $f^{\star j+1/2}$.

$$\frac{f^{j+1} - f^{\star j+1/2}}{\delta t/2} + D_{\parallel}^{j+1/2} f^{\star j+1/2} + D_{\perp}^{j+1/2} f^{j+1} = G^{j+1/2} \quad (6.14)$$

Cela donne f^{j+1} , correspondant à la valeur de f à la fin du pas de temps.

Les termes impliquant les dérivées croisées en vitesse sont traités de manière explicite à chaque étape de l'algorithme.

En considérant la valeur f^{j+1} obtenue comme une valeur provisoire $f^{\star j+1}$ de f à la fin du pas de temps et en prenant la moyenne des deux équations (6.13) et (6.14), on arrive à la relation suivante :

$$\frac{f^{j+1} - f^j}{\delta t} + \left(D_{\parallel}^{j+1/2} + D_{\perp}^{j+1/2} \right) \frac{f^{j+1} + f^j}{2} = G^{j+1/2},$$

de sorte que le schéma temporel soit globalement centré en temps. On constate en pratique que la précision de la méthode itérative ne s'améliore pas au-delà des deux premières itérations ainsi décrites. Le schéma est stable sans avoir de restriction particulière sur le pas de temps. Toutefois, l'utilisation d'un pas de temps plus grand que le temps de collision local conduit inévitablement à des erreurs numériques pouvant devenir importantes. Il est donc préférable d'effectuer les itérations décrites avec une valeur de pas de temps δt proche de la valeur du temps de collision local.

6.3.5 Potentiels de Rosenbluth électroniques

On tient compte des collisions des ions sur les électrons, en ajoutant aux potentiels de Rosenbluth ioniques, les potentiels de Rosenbluth électroniques. Hors, dans la limite du développement à l'ordre 1 en $\varepsilon = (m_e/m_i)^{1/2}$, les électrons sont modélisés par une approche fluide et les potentiels électroniques se réduisent à des expressions analytiques simples. On peut alors directement rajouter leur contribution aux potentiels ioniques, sous la forme d'une partie purement explicite supplémentaire. En sommant sur l'ensemble des espèces ioniques, et en ajoutant la contribution électronique, on arrive à l'expression suivante pour les potentiels de Rosenbluth totaux :

$$\begin{aligned}\mathcal{S} &= \sum_{j=1}^n \frac{4\pi Z_i^2 Z_j^2 \text{Log} \Lambda_{ij}}{A_i A_j} \mathcal{S}_j + \mathcal{S}_e \quad \text{et} \quad \mathcal{T} = \sum_{j=1}^n \frac{4\pi Z_i^2 Z_j^2 \text{Log} \Lambda_{ij}}{A_i^2} \mathcal{T}_j + \mathcal{T}_e \\ \mathcal{S}_e &= \Lambda_e \frac{(v_x - u_i)^2 + v_\perp^2}{2} \quad \text{et} \quad \mathcal{T}_e = -\frac{T_e \Lambda_e}{A_i} \frac{(v_x - u_i)^2 + v_\perp^2}{2} \\ \text{avec } \Lambda_e &= \frac{\varepsilon \sqrt{2} Z_i^2 n_e \text{Log} \Lambda_{ie}}{3\sqrt{\pi} A_i T_e^{3/2}}\end{aligned}$$

où T_e désigne la température électronique (et non le potentiel de Rosenbluth électronique).

6.3.6 Calcul des potentiels de Rosenbluth résiduels : équation de Poisson

On se propose dans cette section de décrire la résolution numérique de l'équation de Poisson, nécessaire pour calculer la partie résiduelle des potentiels de Rosenbluth. L'essentiel de la dépendance en vitesse étant absorbé par la partie explicite, la partie résiduelle est nulle aux bords. Cette condition aux limites particulière permet de simplifier la résolution numérique du problème de Poisson. Plus précisément, on cherche à résoudre :

$$\frac{1}{v_\perp} \frac{\partial}{\partial v_\perp} \left(v_\perp \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial v_\perp} \right) + \frac{\partial^2 \mathcal{S}}{\partial^2 v_x^2} = f(v_x, v_\perp)$$

avec la condition aux limites $\mathcal{S}(v_{\text{xmin}}, v_\perp) = \mathcal{S}(v_x, v_{\perp\text{max}}) = \mathcal{S}(v_{\text{xmax}}, v_\perp) = 0$.

A priori, le problème discrétisé correspondant sur un maillage de $N * M$ cellules s'écrit :

$$\frac{\mathcal{S}_{j,k+1} - 2\mathcal{S}_{j,k} + \mathcal{S}_{j,k-1}}{\delta v_\perp^2} + \frac{\mathcal{S}_{j,k+1} - \mathcal{S}_{j,k-1}}{2\delta v_{\perp k} \delta v_\perp} + \frac{\mathcal{S}_{j+1,k} - 2\mathcal{S}_{j,k} + \mathcal{S}_{j-1,k}}{\delta v_x^2} = f_{j,k},$$

pour $j = 1 \dots N - 1$ (direction longitudinale), et $k = 1 \dots M - 1$ (direction perpendiculaire),

avec, sur les bords du domaine de calcul, les conditions aux limites discrétisées :

$\mathcal{S}_{0,k} = \mathcal{S}_{N,k} = 0$, pour tout k et $\mathcal{S}_{j,M} = 0$, pour tout j .

Le calcul direct de \mathcal{S} à partir de f implique donc la résolution d'un système de $(N - 1)(M - 1)$ équations linéaires. Afin de minimiser le nombre d'opérations impliquées, une méthode plus judicieuse (issue de [39]) consiste à procéder en trois étapes de la façon suivante :

• 1) Transformation de la distribution du second membre en série de sinus sur la direction longitudinale ; l'équation de Poisson discrétisée ci-dessus se transforme alors en l'équation suivante :

$$\frac{\tilde{\mathcal{S}}_{m,k+1} - 2\tilde{\mathcal{S}}_{m,k} + \tilde{\mathcal{S}}_{m,k-1}}{\delta v_{\perp}^2} + \frac{\tilde{\mathcal{S}}_{m,k+1} - \tilde{\mathcal{S}}_{m,k-1}}{2\delta v_{\perp,k}\delta v_{\perp}} + \frac{2}{\delta v_x^2} \left(\cos \frac{\pi m}{N} - 1 \right) \tilde{\mathcal{S}}_{m,k} = \tilde{f}_{m,k}, \quad (6.15)$$

où la transformée en série de sinus sur l'indice j (correspondant à la direction longitudinale) d'une fonction discrétisée f s'écrit :

$$\tilde{f}_{m,k} = \sum_{j=1}^{N-1} f_{j,k} \sin \frac{\pi m j}{N}, \text{ pour tout } k. \quad (6.16)$$

On revient à f par la transformée discrète inverse :

$$f_{j,k} = \frac{2}{N} \sum_{m=1}^{N-1} \tilde{f}_{m,k} \sin \frac{\pi m j}{N}, \text{ pour tout } k. \quad (6.17)$$

La transformation en série de sinus peut s'exprimer en fonction de la transformée de Fourier classique, ce qui permet d'utiliser pour l'effectuer l'algorithme de transformation de Fourier rapide (ou "FFT" ; voir [64]) ; elle est plus adaptée à la description d'une fonction qui s'annule au bord de l'intervalle de discrétisation, comme c'est le cas ici. La condition de frontière de Dirichlet est ainsi automatiquement prise en compte.

• 2) Inversion, pour chaque valeur de l'indice m , du système de $M-1$ équations (6.15), qui fournit $\tilde{\mathcal{S}}_{m,k}$. Chaque système à résoudre implique seulement une matrice tridiagonale.

• 3) Transformation du résultat en série de sinus inverse suivant (6.17), ce qui donne finalement $\mathcal{S}_{j,k}$.

On répète les opérations énumérées ci-dessus pour le calcul du second potentiel \mathcal{T} , en utilisant cette fois-ci \mathcal{S} comme terme source au second membre. Le nombre d'opérations global impliqué par ce calcul est donc de l'ordre de $MN \text{Log} N$ où le facteur $N \text{Log} N$ représente le nombre d'opérations effectué pour la FFT.

6.3.7 Optimisation du schéma numérique des collisions à l'échelle thermique

Afin de conserver une certaine précision dans le calcul, du fait que le schéma n'est pas purement implicite et qu'il ne se comporte pas bien quand le pas de temps δt devient supérieur au temps de collision, on effectue plusieurs fois le calcul des collisions sur un pas de temps δt_0 proche du temps de collision minimal rencontré dans la distribution. On répète l'opération jusqu'à reconstituer le pas de temps demandé, ce qui se fait a priori en $N_c = \delta t / \delta t_0$ itérations. À chaque itération, on examine la variation de la distribution. Si celle-ci est trouvée inférieure à un certain taux on interrompt la boucle car on suppose que ceci indique que la distribution est proche de l'équilibre. Il est donc inutile de continuer le calcul des collisions sur une distribution presque complètement relaxée. Ceci est attendu dans les simulations de systèmes réalistes correspondant par exemple au combustible

DT de cibles de FCI dans lesquels on s'intéresse aux effets cinétiques dans les zones modérément collisionnelles (point chaud et entrée de la coquille de combustible dense). Dans les zones très collisionnelles (coquille de combustible dense), on veut simplement retrouver l'équilibre thermodynamique de la façon la moins coûteuse en temps de calcul.

L'application de cette idée est compliquée par le fait que plusieurs échelles de temps collisionnelles éventuellement très différentes sont présentes. En particulier, on va supposer qu'il existe essentiellement deux fréquences de collision, l'une ionique ω_i et l'autre pour les collisions électron-ion ω_e , avec a priori $\omega_e \ll \omega_i$. Pour traiter les collisions ioniques on va donc subdiviser le pas de temps δt en N_{ci} sous-itérations sur un temps $\delta t_0 = \delta t/N_{ci}$ (qui est a priori de l'ordre de $1/\omega_i$), et interrompre éventuellement la boucle au bout d'un nombre d'itérations $N < N_{ci}$. De ce fait, si on ne prend pas de mesures particulières, l'effet des collisions électroniques sera diminué d'un facteur N/N_{ci} .

Pour traiter correctement les collisions électron-ion malgré le nombre insuffisant d'itérations, on multiplie le terme de collision correspondant (et donc la fréquence ω_e) par un facteur d'accélération pour avancer le plus possible le calcul des collisions électroniques dans les premières itérations. On envisage alors deux cas :

- Soit $\omega_e < 1/\delta t$, et on peut appliquer à ω_e un facteur $\delta t/\delta t_0$. Ceci termine le calcul des collisions électroniques au bout de $N_{ce} = 1$ itération tout en conservant bien un taux de variation par itération $\delta t_0 \times (\delta t/\delta t_0)\omega_e$ inférieur à 1 pour ce terme.

- Soit $1/\delta t_0 > \omega_e > 1/\delta t$ (on calcule δt_0 de telle sorte que la première inégalité soit toujours satisfaite), auquel cas on est limité à un facteur d'accélération égal à $1/(\omega_e \delta t_0)$ pour conserver un taux de variation par itération inférieur à 1. Il faut alors a priori effectuer $N_{ce} = \omega_e \delta t$ itérations pour que les collisions électroniques soient entièrement prises en compte. Cependant on peut alors appliquer pour interrompre l'itération le même critère sur la variation relative de la distribution que dans le cas des collisions ioniques, ceci afin de détecter une situation quasi-stationnaire.

Ainsi, en pratique on calcule d'abord les nombres d'itérations nécessaires aux termes de collision électronique et ionique

$$N_{ce} = 1 + E(\omega_e \delta t) \quad \text{et} \quad N_{ci} = 1 + E(\max(\omega_i, \omega_e) \delta t)$$

où $E(x)$ désigne la partie entière de x , puis le pas de temps élémentaire et le facteur d'accélération α

$$\delta t_0 = \delta t/N_{ci} \quad \text{et} \quad \alpha = \frac{N_{ci}}{N_{ce}}$$

et on annule la fréquence de collision électronique dès qu'on a effectué N_{ce} itérations.

6.4 Advection de la composante thermique

On expose ici la méthode de résolution de la phase de transport des particules thermiques. Pour une vitesse v fixée, le transport dans l'espace physique inhomogène est modélisé par :

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f_i = 0, \tag{6.18}$$

dont on connaît la solution exacte :

$$f_i(\vec{r}, \vec{v}, t + \Delta t) = f_i(\vec{r} - \vec{v}\Delta t, \vec{v}, t). \quad (6.19)$$

On applique la méthode générale des *caractéristiques* consistant à calculer la position advectée dans l'espace des phases, puis à procéder par interpolation pour évaluer la fonction de distribution au point ainsi calculé.

La résolution numérique de l'advection en géométrie sphérique est plus complexe que dans le cas plan pour lequel l'action de l'advection est de simplement décaler en bloc la distribution pour une vitesse longitudinale v_x donnée. En géométrie sphérique, la base locale $(\vec{e}_r, \vec{e}_\theta)$ dépend du point de l'espace considéré, ce qui induit un couplage entre les variables d'espace et de vitesse. On applique alors une méthode dans l'esprit de la référence [80], consistant à effectuer un décalage et interpolation d'une représentation de la fonction de distribution en splines cubiques dans les trois directions (r, v_r, v_\perp) . Il a néanmoins fallu adapter la méthode pour traiter le cas où le maillage en vitesse est variable d'une cellule spatiale à l'autre.

6.4.1 Réalisation de l'advection en coordonnées sphériques

On définit un système de coordonnées dans lequel l'advection en géométrie sphérique est une opération simple :

$$v = \sqrt{v_\perp^2 + v_r^2}$$

est la vitesse d'une particule libre,

$$b = \frac{rv_\perp}{\sqrt{v_\perp^2 + v_r^2}}$$

est son paramètre d'impact par rapport au centre, et

$$s = \frac{rv_r}{\sqrt{v_\perp^2 + v_r^2}}$$

est l'abscisse de la particule le long de sa trajectoire (voir figure 6.4 ci-dessous). La transformation inverse s'écrit :

$$\begin{aligned} r &= \frac{\sqrt{s^2 + b^2}}{v} \\ v_r &= \frac{vs}{\sqrt{s^2 + b^2}} \\ v_\perp &= \frac{vb}{\sqrt{s^2 + b^2}} \end{aligned}$$

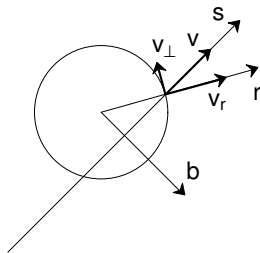


FIGURE 6.4 – Transformation des coordonnées de l'espace des phases pour l'advection en géométrie sphérique.

Les dérivées partielles de passage d'un système à l'autre sont :

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial s}{\partial r}\right) &= \frac{s}{\sqrt{s^2+b^2}} & \left(\frac{\partial b}{\partial r}\right) &= \frac{b}{\sqrt{s^2+b^2}} & \left(\frac{\partial v}{\partial r}\right) &= 0 \\ \left(\frac{\partial s}{\partial v_r}\right) &= \frac{b^2}{v\sqrt{s^2+b^2}} & \left(\frac{\partial b}{\partial v_r}\right) &= \frac{-bs}{v\sqrt{s^2+b^2}} & \left(\frac{\partial v}{\partial v_r}\right) &= \frac{s}{\sqrt{s^2+b^2}} \\ \left(\frac{\partial s}{\partial v_\perp}\right) &= \frac{-bs}{v\sqrt{s^2+b^2}} & \left(\frac{\partial b}{\partial v_\perp}\right) &= \frac{s^2}{v\sqrt{s^2+b^2}} & \left(\frac{\partial v}{\partial v_\perp}\right) &= \frac{b}{\sqrt{s^2+b^2}} \end{aligned}$$

À partir de là on peut calculer l'élément d'intégration dans chacun des deux systèmes ; on obtient :

$$4\pi r^2 dr 2\pi v_\perp dv_\perp dv_r = 2\pi b db ds 4\pi v^2 dv$$

Dans les unités (s, b, v) les équations du mouvement d'une particule libre s'écrivent simplement :

$$\frac{ds}{dt} = v ; \quad \frac{db}{dt} = 0 ; \quad \frac{dv}{dt} = 0$$

ce qui permet de calculer la transformation pendant δt des coordonnées (r, v_r, v_\perp) :

$$r(t + \delta t) = \sqrt{r(t)^2 + 2r(t)v_r(t)\delta t + v^2\delta t^2} \quad (6.20)$$

$$v_r(t + \delta t) = \frac{r(t)v_r(t) + v^2\delta t}{r(t + \delta t)} \quad (6.21)$$

$$v_\perp(t + \delta t) = \frac{r(t)v_\perp(t)}{r(t + \delta t)} \quad (6.22)$$

6.4.2 Implémentation numérique

On applique simplement pour chaque nœud du maillage les formules ci-dessus avec un signe négatif pour le pas de temps, puis on détermine la position dans le maillage du point de départ ainsi calculé. On interpole alors la distribution sur les trois directions r, v_r, v_\perp . Compte tenu que le maillage en vitesse est variable d'une cellule spatiale à l'autre¹⁵, on ne peut utiliser la méthode d'interpolation par splines cubiques de façon directe sur l'ensemble du maillage comme dans la référence [80]. On l'utilise donc uniquement sur l'espace des vitesses pour chaque cellule spatiale, et l'interpolation spatiale est effectuée par une méthode qui doit être choisie de façon à limiter autant que possible la diffusion numérique dans la direction spatiale.

Le point d'arrivée dans l'espace des phases est choisi au milieu de chaque cellule, c'est-à-dire dans les notations de la section 6.6 en $v_r = v_{rj}$, $v_\perp = v_{\perp k}$ et en $r = (r_{i-1} + r_i)/2$ où r_i pour $i = 0$ à i_{max} est la position de la frontière supérieure de la i -ème cellule spatiale.

Les conditions aux limites utilisées pour les splines cubiques dans l'espace des vitesses correspondent à celles de la référence [80], à savoir "not-a-knot" (voir la référence [23] en ce qui concerne les splines) en v_r et sur la frontière supérieure des v_\perp , et dérivée nulle en $v_\perp = 0$ (c'est-à-dire au milieu entre les deux premiers points de grille $k = 0$ et $k = 1$).

En ce qui concerne l'interpolation spatiale, on a utilisé essentiellement deux méthodes, à savoir :

15. La grille en vitesse thermique est en effet adaptée à la température locale, variable d'un point spatial à l'autre, voir section 6.6.2

- une simple interpolation linéaire de $f(v_r, v_\perp)$ entre les deux points de grille adjacents i et $i+1$, méthode qui a l'avantage d'être directe, rapide et positive, mais qui s'avère très diffusive ;
- une interpolation cubique entre les points de grille adjacents i et $i+1$ en fixant les valeurs de f aux nœuds f_i et f_{i+1} ainsi que des dérivées $\partial f / \partial r$ sur les nœuds, celles-ci étant évaluées par la différence centrée $(f_{i+1} - f_{i-1}) / (r_{ci+1} - r_{ci-1})$ limitée de façon à ne pas faire apparaître de nouvel extremum de f dans la cellule i , c'est-à-dire entre r_i et r_{i-1} (dans l'expression ci-dessus $r_{ci} = (r_i + r_{i-1})/2$ désigne la position du centre de la cellule i).

En pratique, on utilise principalement la seconde méthode.

Dans la procédure d'interpolation en espace, les pentes sont limitées pour éviter l'apparition de nouveaux extremas entre les points de discrétisation, cela pouvant conduire à les problèmes de positivité et de stabilité (voir section 6.8 et [28]).

Remarque 6.4.1 *Comme on fait des simulations collisionnelles, bien qu'il n'y ait pas de contrainte de CFL à strictement parler sur l'advection, il faut quand même éviter d'advecter des particules sur des distances plus grandes que leur libre parcours de collision pendant une étape d'advection.*

6.4.3 Conditions initiale et aux limites pour l'advection

La simulation est initialisée à partir de profils de densité, vitesse et température (issus par exemple d'une simulation hydrodynamique préalable de la même configuration de cible) qui permettent de construire dans chaque maille spatiale la distribution ionique maxwellienne correspondante. De même la condition limite sur la frontière extérieure du domaine de simulation est une distribution maxwellienne déduite d'un profil temporel des mêmes grandeurs hydrodynamiques. La position en laquelle ces grandeurs sont mesurées servant à redimensionner la taille du maillage spatial au cours de la simulation.

6.5 Accélération de la composante thermique

Dans cette étape on résout la partie de l'équation de Vlasov (membre de gauche de l'équation (3.28)) concernant l'action du champ électrique :

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \frac{\mathcal{E}_i}{A_i} \frac{\partial f_i}{\partial v_r} = 0 \quad (6.23)$$

où le champ effectif \mathcal{E}_i vaut :

$$\mathcal{E}_i = -\frac{Z_i}{n_e} \frac{\partial P_e}{\partial r} \quad (6.24)$$

Cette opération impliquant une variation de l'énergie des ions, on obtient un traitement conservatif en effectuant en même temps le calcul du travail des forces de pression électronique, ainsi qu'il est décrit plus en détail dans la section 6.11 traitant des électrons. En

effet, en prenant les moments sur v_r et v_r^2 de l'équation (6.53), on obtient respectivement (la variation de la densité n_i étant nulle) :

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}(A_i u_i) &= \mathcal{E}_i \\ \frac{\partial}{\partial t}(E_{cri}) &= n_i u_i \mathcal{E}_i\end{aligned}$$

où

$$E_{cri} = \frac{A_i}{2} \int v_r^2 f_i d^3v = \frac{1}{2} A_i n_i u_i^2 + \frac{1}{2} n_i T_{ir}$$

désigne la densité d'énergie cinétique dans la direction radiale des particules de l'espèce i . La somme sur les espèces de cette dernière équation, compte tenu de l'expression (6.24) du champ effectif et des conditions de quasineutralité et de courant nul, conduit à :

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_i E_{cri} = -u_e \frac{\partial P_e}{\partial r}$$

et on constate donc que l'énergie cinétique totale gagnée par les ions dans l'accélération est bien perdue par les électrons. Elle est en effet égale à l'opposé du second membre de l'équation (6.62) (voir sur ce point la Section 6.11.2).

6.6 Choix du maillage

L'utilisation d'un maillage rectangulaire régulier dans les trois directions r , v_r et v_\perp est adaptée à la simulation de systèmes qui ne présentent pas de contrastes de densité et de température trop importants, tels que les problèmes d'onde de choc traités dans la référence [18]. Par ailleurs, l'utilisation d'un tel maillage, lorsqu'elle est possible, procure un avantage certain au niveau du calcul de l'advection en géométrie plane, et même en géométrie sphérique puisqu'elle autorise l'utilisation d'une description globale de la distribution en splines cubiques, comme cela est fait dans la référence [80].

Dans des cas moins académiques, et en particulier lorsqu'on s'attaque au problème de l'implosion de cibles de FCI, on peut se trouver en présence de contrastes de densité et de température de plusieurs décades, et il est totalement prohibitif en termes de temps de calcul et d'espace mémoire et sur disque d'utiliser un maillage régulier. On est donc amené, d'une part, à utiliser un maillage spatial de pas variable, et d'autre part, à ajuster le maillage dans l'espace des vitesses aux paramètres de la fonction de distribution présente en chaque point de l'espace, en termes de pas de grille ainsi que de position globale.

6.6.1 Maillage spatial

Ayant en vue des simulations d'implosion de configurations réalistes de cibles de FCI, dans lesquelles les longueurs caractéristiques (libres parcours de collision et longueurs de gradient) augmentent fortement depuis la couche externe de combustible dense et froid

jusqu'au centre chaud et peu dense, on choisit d'utiliser un maillage spatial à progression géométrique :

$$\begin{aligned} r_0 &= 0 \\ r_{i+1} - r_i &= \alpha(r_i - r_{i-1}) \end{aligned}$$

où la valeur de la raison α est fixée à l'initialisation de la simulation, tandis que la taille totale du maillage peut selon l'option choisie s'ajuster au cours du temps pour suivre l'évolution des dimensions du système étudié. En pratique, pour les simulations de cibles FCI, on cherche à adapter la taille des cellules près du centre ainsi que dans la zone dense. On a utilisé les valeurs suivantes (les rayons sont en μm , le but est de faire passer de façon régulière la taille des cellules d'une valeur de l'ordre de 10 à 20 μm près du centre de la cible à une valeur de l'ordre du micron au voisinage de la frontière extérieure) :

$r[1] - r[0]$	$r[n] - r[n - 1]$	$r[n] - r[0]$	raison	n
23.7	1.0063	350	0.935	48
21.2	0.92116	360	0.9436	55
12.6	0.92082	360	0.9674	80

Les simulations présentées au chapitre 7 correspondent au cas le plus fin, pour lesquelles on vérifie qu'une convergence en maillage est atteinte.

L'évolution temporelle du maillage spatial dépend du type de condition limite en espace choisi. Dans le cas d'une condition limite censée s'appliquer en un rayon variable (cf sec. 6.4.3), la taille des cellules du maillage tel que défini ci-dessus est ajustée au cours du calcul (sans changer la raison) pour que la frontière droite corresponde à la position de la condition limite. Dans le cas contraire le maillage est fixe, la taille des cellules est définie à l'initialisation du cas.

6.6.2 Maillage en vitesse pour la grille thermique

Pour tenir compte des variations de la température et de la vitesse d'ensemble dans l'espace et au cours du temps, on adapte dans chaque cellule spatiale le maillage en vitesse à la vitesse hydrodynamique et à la vitesse thermique dans la cellule, ainsi qu'aux vitesses correspondantes dans les cellules adjacentes pour anticiper l'arrivée de particules due à l'advection. Le maillage de l'espace (v_r, v_\perp) est par ailleurs régulier. De façon précise on prend :

$$\begin{aligned} v_{rj} &= j\delta v_r + v_0 & \text{pour} & \quad -j_{max}/2 \leq j \leq j_{max}/2 \\ v_{\perp k} &= (k - 1/2)\delta v_\perp & \text{pour} & \quad 0 \leq k \leq k_{max}. \end{aligned}$$

Ci-dessus v_0 est une vitesse longitudinale de référence autour de laquelle est centré le maillage. De plus, on prend $\delta v_\perp = \delta v_r$. Les cellules $k = 0$ correspondant à une vitesse perpendiculaire négative sont introduites pour faciliter l'application de la condition limite sur la distribution en $v_\perp = 0$. De même, les cellules correspondant à $k = k_{max}$ et à $j = \pm j_{max}/2$ reçoivent une valeur nulle de la distribution, correspondant à la condition limite utilisée pour le terme de collision.

6.6.3 Adaptation dynamique du maillage en vitesse

Le maillage défini comme ci-dessus par la donnée en chaque point de l'espace d'une vitesse centrale v_0 et d'un pas δv est redéfini avant chaque étape d'advection par une relaxation vers un état considéré comme optimal dans lequel la vitesse centrale est égale à la vitesse hydrodynamique u et le pas de vitesse est tel que $v_{th}/\delta v = v_{max}/v_{th}$ où v_{th} est la vitesse thermique et $v_{max} = \delta v \times j_{max}/2$. On fournit à la routine chargée de calculer cette relaxation des valeurs de v_{th} et u qui tiennent compte des particules des cellules adjacentes susceptibles de pénétrer dans la cellule considérée du fait de l'advection.

6.7 Collisions à l'échelle suprathermique

Nous passons maintenant au traitement numérique de la composante suprathermique associée aux particules α .

La composante suprathermique de la fonction de distribution des particules α est gouvernée par l'équation de Vlasov-Fokker-Planck suivante (écrite en dans le système d'unités 3.1) :

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_\alpha^{ST}}{\partial t} + v \cos \theta \frac{\partial f_\alpha^{ST}}{\partial r} + \frac{\mathcal{E}_\alpha}{A_\alpha} \cos \theta \frac{\partial f_\alpha^{ST}}{\partial v} &= \sum_i \tilde{\Gamma}_{\alpha i} \frac{\partial}{\partial \vec{v}} \cdot \left[\frac{n_i}{v^2} \left(\frac{A_\alpha}{A_i} f_\alpha^{ST} \vec{e}_v + \frac{1}{2} \frac{\partial f_\alpha^{ST}}{\partial \theta} \vec{e}_\theta \right) \right] \\ &+ \frac{1}{\tilde{\tau}_{e\alpha}} \frac{\partial}{\partial \vec{v}} \cdot \left[(\vec{v} - \vec{u}_e) f_\alpha^{ST} + \frac{T_e}{A_\alpha} \frac{\partial}{\partial \vec{v}} f_\alpha^{ST} \right] \\ &- \sum_{i=D,T,\alpha} 4\pi \tilde{\Gamma}_{\alpha i} \frac{A_\alpha}{A_i} f_\alpha^{ST} f_i^T \\ &+ \mathcal{R}_{DT}(\vec{r}, t) \frac{\delta(v - v_h)}{4\pi v^2}, \end{aligned} \quad (6.25)$$

avec $\tilde{\Gamma}_{\alpha i} = (4\pi Z_\alpha^2 Z_\beta^2 / A_i^2) \ln \Lambda_{\alpha i}$ et où $\tilde{\tau}_{e\alpha}$ est le temps de collision électron- α adimensionné valant :

$$\tilde{\tau}_{e\alpha} = \frac{3\sqrt{\pi} A_\alpha T_e^{3/2}}{2\varepsilon \sqrt{2} Z_\alpha^2 n_e \ln \Lambda_{\alpha e}}.$$

Dans l'équation (6.25), nous avons introduit un terme supplémentaire par rapport à l'équation de Vlasov-Fokker-Planck initiale. Ce terme situé en troisième position dans le membre droite modélise le couplage avec la composante thermique du point de vue des particules suprathermiques (voir discussion du chapitre précédent).

Du point de vue des particules rapides, le terme peut être bien approché par :

$$\sum_i 4\pi \tilde{\Gamma}_{\alpha i} \frac{A_\alpha}{A_i} f_\alpha^{ST} f_i \simeq 4\pi \sum_i \tilde{\Gamma}_{\alpha i} \frac{A_\alpha}{A_i} f_\alpha^{ST} n_i \delta^3(\vec{v}), \quad (6.26)$$

en supposant que $v \gg v_i^{th}, V_0$. Le terme (6.26) est ainsi fortement piqué dans la zone de l'espace des vitesses correspondant aux cibles thermiques et conduit à la formation d'un condensat très localisé. Ce dernier ne peut être décrit sur le maillage suprathermique,

dont le pas est par construction bien supérieur à la taille du support du condensat. Cela nous conduit à soustraire ce terme de l'équation pilotant l'évolution de la composante suprathermique, afin de ne conserver que des termes qui ne varient que sur la grande échelle de vitesse v_α^{ST} . Le terme (6.26) est alors ré-introduit sous la forme d'un *terme source* dans l'équation définissant la composante thermique. En faisant la somme des deux équations associées à chacune des composantes, on retrouve bien l'équation de Vlasov-Fokker-Planck initiale régissant l'évolution de la fonction de distribution complète $f_\alpha = f_\alpha^{ST} + f_\alpha^T$.

6.7.1 Discrétisation de l'opérateur de Fokker-Planck

La partie collisionnelle de l'équation (6.25) peut se récrire suivant :

$$\left. \frac{\partial f_\alpha^{st}}{\partial t} \right|_{\text{coll}} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial}{\partial v} (v^2 J^v) + \frac{1}{v \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta J^\theta), \quad (6.27)$$

où les composantes polaires du courant de ralentissement \vec{J} sont données par :

$$J^v = f_\alpha^{ST} \left(\frac{v}{\tau_{e\alpha}} + \tilde{\Gamma}_{\alpha i} \frac{A_\alpha n_i}{A_i v^2} \right) + \frac{1}{\tilde{\tau}_{e\alpha}} \frac{T_e}{A_\alpha} \frac{\partial f_\alpha^{ST}}{\partial v}, \quad (6.28)$$

et

$$J^\theta = \frac{1}{v} \frac{\partial f_\alpha^{ST}}{\partial \theta} \left(\tilde{\Gamma}_{\alpha i} \frac{n_i}{2v} + \frac{1}{\tilde{\tau}_{e\alpha}} \frac{T_e}{A_\alpha} \right). \quad (6.29)$$

Le courant de ralentissement \vec{J} prend la forme générale de type advection-diffusion dans l'espace des vitesses :

$$\begin{pmatrix} J^v \\ J^\theta \end{pmatrix} = f \begin{pmatrix} u^v \\ u^\theta \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} K^{vv} & K^{v\theta} \\ K^{\theta v} & K^{\theta\theta} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial v} \\ \frac{1}{v} \frac{\partial f}{\partial \theta} \end{pmatrix} \quad (6.30)$$

où les composantes des champs u et K sont liées aux dérivées en vitesse des potentiels de Rosenbluth \mathcal{S} and \mathcal{T} (associés aux ions cibles). De manière plus précise, on a :

$$\begin{pmatrix} u^v \\ u^\theta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial v} \\ \frac{1}{v} \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial \theta} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \begin{pmatrix} K^{vv} & K^{v\theta} \\ K^{\theta v} & K^{\theta\theta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 \mathcal{T}}{\partial v^2} & \frac{\partial}{\partial v} \left(\frac{1}{v} \frac{\partial \mathcal{T}}{\partial \theta} \right) \\ \frac{\partial}{\partial v} \left(\frac{1}{v} \frac{\partial \mathcal{T}}{\partial \theta} \right) & \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \mathcal{T}}{\partial \theta^2} + \frac{1}{v} \frac{\partial \mathcal{T}}{\partial v} \end{pmatrix}$$

ce qui peut s'écrire selon :

$$\begin{pmatrix} u^v \\ u^\theta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v/\tilde{\tau}_{e\alpha} + \sum_{i=D,T} \tilde{\Gamma}_{\alpha i} n_i / v^2 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} K^{vv} & K^{v\theta} \\ K^{\theta v} & K^{\theta\theta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_e/\tilde{\tau}_{e\alpha} A_\alpha & 0 \\ 0 & \sum_{i=D,T} \tilde{\Gamma}_{\alpha i} n_i / (2v) \end{pmatrix}. \quad (6.31)$$

On remarque que la paramétrisation de l'espace des vitesses selon le système polaire $\vec{v} = v \cos \theta \vec{e}_r + v \sin \theta \vec{e}_\perp$ simplifie considérablement l'expression des termes de ralentissement : le terme de friction dynamique est en effet parallèle au vecteur vitesse radial \vec{e}_v de la base polaire, tandis que le tenseur de diffusion est diagonal. Le choix de la paramétrisation polaire apparaît donc comme un choix naturel pour l'expression des termes de ralentissement impliquant les particules rapides.

On intègre alors l'équation discrète (6.27) par rapport à la vitesse sur une cellule δV_{kj} du maillage en vitesse suprathermique. Les indices k et j font référence à la position de la cellule suivant les directions θ et v respectivement (voir Fig. 6.5).

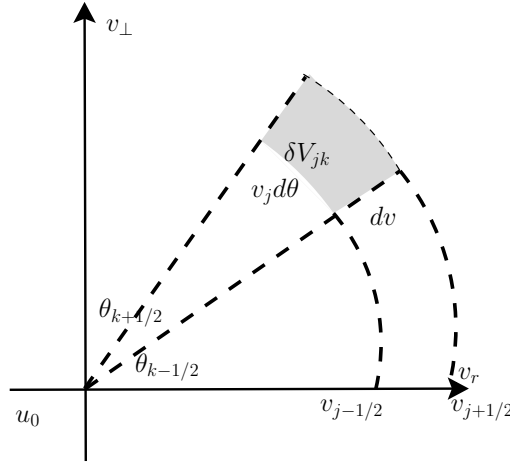


FIGURE 6.5 – Paramétrisation polaire du maillage en vitesse suprathermique.

La cellule δV_{kj} est définie par ses frontières dans l'espace des vitesses $\theta_{k-\frac{1}{2}}$, $\theta_{k+\frac{1}{2}}$ et $v_{j-\frac{1}{2}}$, $v_{j+\frac{1}{2}}$, pour $1 \leq k \leq k_{max}$ et $1 \leq j \leq j_{max}$. On appelle $f_{kj}^n = f_\alpha^{ST}(v = v_j, \theta = \theta_k, t = t_n)$ la valeur de la fonction de distribution au centre de la cellule δV_{kj} au temps t_n . En intégrant l'équation (6.27) sur le volume de la cellule δV_{kj} , on obtient la forme conservative discrète suivante :

$$\frac{f_{kj}^{n+1} - f_{kj}^n}{\Delta t} = \frac{1}{v_j^2} \frac{v_{j+1/2}^2 J_{kj+1/2}^v - v_{j-1/2}^2 J_{kj-1/2}^v}{2\delta v_j^3} + \frac{3v_j \delta v_j}{2\delta v_j^3} \frac{\sin \theta_{k+1/2} J_{k+1/2j}^\theta - \sin \theta_{k-1/2} J_{k-1/2j}^\theta}{\delta \mu_k} \quad (6.32)$$

où les volumes élémentaires sont définis par :

$$\delta v_j^3 = v_{j+\frac{1}{2}}^3 - v_{j-\frac{1}{2}}^3, \quad \delta v_j = v_{j+\frac{1}{2}} - v_{j-\frac{1}{2}}, \quad \delta \mu_k = \cos \theta_{k+\frac{1}{2}} - \cos \theta_{k-\frac{1}{2}}.$$

La vitesse radiale centrée v_j apparaissant dans l'équation (6.32) est définie par $v_j = (v_{j+\frac{1}{2}} + v_{j-\frac{1}{2}})/2$. Avec ces notations, le volume de la cellule δV_{kj} est donné par :

$$\delta V_{kj} = \int_{\delta V_{kj}} 2\pi v^2 \sin \theta \, dv \, d\theta = \frac{4\pi}{3} \delta v_j^3 \delta \mu_k.$$

En outre, on discrétise le courant de ralentissement par une approche de type différences

finies explicite :

$$J_{kj+1/2}^v = \frac{u_{kj+1/2}^v}{2}(f_{kj+1}^n + f_{kj}^n) - \frac{K_{kj+1/2}^{vv}}{\delta v_{j+1/2}}(f_{kj+1}^n - f_{kj}^n) \quad (6.33)$$

$$J_{k+1/2j}^\theta = \frac{K_{k+1/2j}^{\theta\theta}}{v_j \delta \theta_{k+1/2}}(f_{k+1j}^n - f_{kj}^n), \quad (6.34)$$

où les coefficients u et K pilotant le ralentissement sont donnés explicitement en fonction de la vitesse par (6.31). Les termes de l'équation (6.31) fonctions du temps impliquant les ions cibles thermiques et les électrons sont évalués au pas de temps précédent $t = t_n$.

6.7.2 L'algorithme LSE (Locally Sub-cycled Explicit)

Pertinence de l'approche explicite

Le terme de ralentissement et le tenseur de diffusion donnés par l'équation (6.31) sont très inhomogènes dans l'espace des vitesses. Par exemple, l'amplitude des termes du tenseur de diffusion s'intensifie significativement dans la zone thermique, et décroît très rapidement pour des vitesses plus élevées. Le courant de ralentissement associé est en outre très anisotrope, essentiellement transverse. Dans une telle situation, les schémas implicites usuels risquent de conduire à une matrice mal conditionnée. La résolution du système linéaire correspondant peut alors conduire à une solution approchée, qui est susceptible de dévier de la solution du problème non stationnaire. La dynamique réelle du système est plus naturellement suivie par une approche explicite. L'inconvénient majeur de telles méthodes est qu'elles nécessitent des pas en temps très fins, et sont donc en général trop coûteuses. Néanmoins, dans la situation que l'on désire traiter ici, il est possible d'exploiter les inhomogénéités des termes de ralentissement afin de construire une approche explicite qui n'entraîne pas des temps CPU prohibitifs. L'approche que l'on propose s'appuie sur des idées présentées dans l'article [52].

Ecrivons la condition de stabilité de Von-Neumann associée au schéma (6.32), dans le cas simplifié où le coefficient de ralentissement u et le tenseur de diffusion K sont homogènes :

$$(u \delta t)^2 \leq 2\text{Tr}(K) \delta t \leq \delta v^2, \quad (6.35)$$

où δv est la taille du maillage en vitesse. Dans le cas réel où le coefficient de ralentissement u et le tenseur de diffusion K dépendent de la vitesse, on peut appliquer la condition (6.35) *localement* dans chaque cellule δV_{jk} de l'espace des vitesses. En outre, comme le schéma écrit en (6.32) est bi-dimensionnel paramétré en coordonnées polaires, la condition (6.35) se décline en deux conditions de stabilité, chacune étant associée à une direction particulière, la direction radiale v ou angulaire θ .

En traitant séparément les deux directions, la condition de stabilité (6.32) écrite dans la maille δV_{jk} s'écrit :

– pour la direction radiale v :

$$\left(\frac{u_j^v \delta t}{\delta v_j} \right)^2 \leq \frac{2(K_j^{vv}) \delta t}{\delta v_j^2} \leq 1 \quad (6.36)$$

– pour la direction angulaire θ :

$$\frac{2(K_j^{\theta\theta})\delta t}{v_j^2\delta\theta_k^2} \leq 1. \quad (6.37)$$

Remarque 6.7.1 *Le coefficient de ralentissement u et le tenseur de diffusion K donnés par (6.31) ne dépendent en fait que de v .*

L'idée est alors d'appliquer le schéma explicite (6.32) en respectant les conditions de stabilité (6.36) et (6.37) appliquées *localement* dans chaque cellule du maillage en vitesse. En effet, le schéma (6.32) correspond à une formulation de type volumes finis d'une équation de conservation. L'évolution temporelle de la fonction de distribution définie aux centres des mailles est pilotée par la différence entre les flux numériques calculés aux frontières de la maille considérée. Les flux dépendent de la valeur de la fonction de distribution dans les mailles voisines. Une instabilité numérique est alors susceptible de se développer si le flux multiplié par le pas de temps Δt devient plus grand que la valeur absolue des champs des cellules mitoyennes. Il faut donc appliquer les flux pendant une durée *limitée* $\Delta t'$, pouvant être plus petit que le pas de temps global imposé Δt . Le temps d'application des flux $\Delta t'$ est choisi de façon à assurer une variation raisonnable de la valeur des champs dans les mailles voisines, inférieure à leur valeur absolue initiale. Il s'agit alors de *sous-cycler* l'avancée des flux et des champs, en les mettant à jour de façon cohérente suivant une fréquence $\frac{1}{\Delta t'}$, jusqu'à atteindre le pas de temps imposé Δt .

Stabilité et positivité du schéma

Les conditions de stabilité (6.36) et (6.37) assurent par construction la stabilité du schéma explicite (6.32), mais pas nécessairement sa positivité. Aussi, nous avons observé que l'application du schéma (6.32) avec les conditions de stabilité pouvaient conduire au développement de structures oscillantes non physiques se propageant sur la grille de vitesse suprathermique. Un tel artefact numérique est en particulier susceptible de se développer pour les vitesses élevées, correspondant à des valeurs importantes du coefficient de ralentissement u . Ceci peut par exemple se produire au voisinage des vitesses correspondant à la zone de création des produits de fusion (à $v_h \sim 1.3 \times 10^9 \text{ cm.s}^{-1}$).

Une solution possible pour pallier à ce type d'instabilités, consiste à décentrer la discrétisation en vitesse du courant radial de ralentissement, et ce de façon adaptative dans l'espace des vitesses. De façon plus précise, nous revenons à l'équation Eq. (6.33) pour introduire le paramètre η_j tel que :

$$J_{kj+1/2}^v = \frac{1}{2}u_{kj+1/2}^v [(1 - \eta_j)f_{kj+1}^n + (1 + \eta_j)f_{kj}^n] - \frac{K_{kj+1/2}^{vv}}{\delta v_{j+1/2}}(f_{kj+1}^n - f_{kj}^n). \quad (6.38)$$

Le choix $\eta_j = 0$ correspond au schéma centré (6.33), tandis que $\eta_j = 1$ conduit à un schéma de type "upwind". Le décentrage de la discrétisation (6.38) peut également s'interpréter

comme une perturbation de la matrice de diffusion. Plus précisément, l'équation (6.38) peut s'écrire sous la forme :

$$J_{kj+1/2}^v = \frac{1}{2} u_{kj+1/2}^v (f_{kj+1}^n + f_{kj}^n) - \tilde{K}^{vv} \frac{f_{kj+1}^n - f_{kj}^n}{\delta v_{j+1/2}}. \quad (6.39)$$

La condition de stabilité (6.36) appliquée avec le coefficient de diffusion modifié $\tilde{K}^{vv} = K_{kj+1/2}^{vv} + \frac{1}{2} u_{kj+1/2}^v \eta_j \delta v_{j+1/2}$ au lieu du coefficient initial K^{vv} défini en (6.31) conduit à une nouvelle condition de stabilité :

$$\frac{1}{2} |u_{kj+1/2}^v|^2 \delta t \leq K_{kj+1/2}^{vv} + \frac{1}{2} u_{kj+1/2}^v \eta_j \delta v_{j+1/2} \quad \text{et} \quad \frac{\delta t}{\delta v_{j+1/2}^2} (2K_{kj+1/2}^{vv} + u_{kj+1/2}^v \eta_j \delta v_{j+1/2}) \leq 1.$$

Par ailleurs, on écrit la condition de positivité en considérant le cas extrême où toute la fonction de distribution est localisée dans une seule cellule de l'espace des vitesses :

$$K_{kj+1/2}^{vv} + \frac{1}{2} u_{kj+1/2}^v \eta_j \delta v_{j+1/2} \geq 0 \quad \text{et} \quad \frac{1}{\delta v_{j+1/2}} \left(2K_{kj+1/2}^{vv} + \frac{1}{2} u_{kj+1/2}^v \eta_j \delta v_{j+1/2} \right) \geq |u_{kj+1/2}^v|.$$

La valeur minimale $u_v \eta$ assurant la positivité du schéma est donc :

$$u_{kj+1/2}^v \eta_j = \max \{ 0, |u_{kj+1/2}^v| - 2K_{kj+1/2}^{vv} / \delta v_{j+1/2} \}. \quad (6.40)$$

Afin de garantir la stabilité et la positivité du schéma explicite, on calcule la composante radiale du courant de ralentissement selon (6.39) où η_j est donné en fonction de la vitesse par (6.40). Cela revient à utiliser le schéma (6.32) avec un coefficient de diffusion radial K^{vv} modifié suivant :

$$\tilde{K}^{vv} = \max \{ K^{vv}, |u^v| \delta v / 2 \}. \quad (6.41)$$

On applique alors la conditions de stabilité (6.36) sur cette matrice de diffusion modifiée.

Remarque 6.7.2 Concernant la condition de stabilité relative à la direction radiale (6.36), la condition imposée sur le coefficient de ralentissement $|u_v| \delta t \leq \delta v$ est automatiquement satisfaite dès que celle imposée sur le coefficient de diffusion modifiée \tilde{K}^{vv} est remplie.

Application locale des conditions de stabilité

Nous exposons maintenant les détails de l'implémentation de l'algorithme appelé LSE -*Locally Sub-cycled Explicit*- relatif aux collisions des particules rapides. L'idée principale est d'appliquer le schéma explicite défini par (6.32) avec les conditions de stabilité (6.36) et (6.37) considérées *localement* dans chaque cellule de la grille en vitesse suprathermique.

En supposant connues les valeurs de la fonction de distribution des α au temps $t = t_n$ f_{jk}^n dans toutes les cellules de l'espace des vitesses suprathermique, on applique la stratégie suivante :

- **Première étape** – Calcul des pas de temps locaux

Pour chaque cellule δV_{jk} de l'espace des vitesses suprathermique, on évalue un pas de temps *local* Δt_{jk} tel que les conditions de stabilité relatives aux directions θ et v (6.37)-(6.36) soient satisfaites. Pour trouver Δt_{jk} , le pas de temps global imposé Δt est sub-divisé jusqu'à ce que les conditions de stabilité soient vérifiées. Le pas de temps local Δt_{jk} est donc donné par :

$$\Delta t_{jk} = \min(\Delta t_{jk}^\theta, \Delta t_{jk}^v), \quad (6.42)$$

avec :

$$\Delta t_{jk}^\theta = 2^{-\text{nsplit}_{jk}^\theta} \Delta t, \quad (6.43)$$

et :

$$\Delta t_{jk}^v = 2^{-\text{nsplit}_{jk}^v} \Delta t. \quad (6.44)$$

$\text{nsplit}_{jk}^\theta$ (resp. nsplit_{jk}^v) désigne le nombre de fois que le pas de temps global doit être sub-divisé pour satisfaire la condition de stabilité dans la direction θ (resp. v).

- **Seconde étape** – *Tri des cellules*

Après le calcul des pas de temps locaux, les cellules de l'espace des vitesses sont triées par ordre croissant de pas temps local Δt_{jk} . Cette étape de tri peut par exemple s'effectuer efficacement par une méthode de type 'Heapsort' [71], qui garantit un nombre d'opérations en $\mathcal{O}(N \ln N)$ à chaque pas de temps, N étant le nombre de cellules contenues dans le maillage en vitesse suprathermique. Cette étape de tri permet à l'algorithme de ne remettre à jour qu'un nombre limité de cellules, à savoir celles caractérisées par un pas de temps local petit. C'est une étape essentielle pour économiser du temps de calcul de manière non négligeable.

- **Troisième étape** – *Sous-cyclage*

L'état de chaque cellule est avancé sur un pas de temps Δt en appliquant les flux dans les deux directions v et θ , de manière cohérente avec le pas de temps local Δt_{jk} , cela assurant la stabilité et la positivité de l'approche. Il s'agit donc de mettre en place un *sous-cyclage* pour chaque cellule en vitesse. On procède donc à une boucle effectuée par rapport au pas de temps local le plus petit. A l'intérieur de la boucle, les champs (calculés au centre des cellules) et les flux (évalués sur les frontières des mailles) sont remis à jour de manière cohérente à une fréquence correspondant au pas de temps local. De manière plus détaillée, on applique la démarche itérative suivante :

$$\frac{f_{kj}^{p+1} - f_{kj}^p}{\Delta t_{jk}} = \frac{3v_j \delta v_j}{2\delta v_j^3} \frac{\sin \theta_{k+1/2} J_{k+1/2j}^{\theta p} - \sin \theta_{k-1/2} J_{k-1/2j}^{\theta p}}{\delta \mu_k} + \frac{1}{v_j^2} \frac{v_{j+\frac{1}{2}}^2 J_{kj+\frac{1}{2}}^{vp} - v_{j-1/2}^2 J_{kj-1/2}^{vp}}{2\delta v_j^3}, \quad (6.45)$$

où l'exposant p fait référence aux itérations du sous-cyclage. Le sous-cyclage est initialisé par $f_{kj}^{p=0} = f_{kj}^n$ et se termine après p_{jk}^{\max} itérations où $\Delta t = p_{jk}^{\max} \Delta t_{jk}$. Durant le processus, les flux $J_{k+1/2j}^\theta$ (resp. $J_{kj+1/2}^v$) définis par (6.34) (resp. (6.39) et (6.40)), sont remis à jour selon une fréquence $1/\Delta t_{jk}^\theta$ (resp. $1/\Delta t_{jk}^v$).

En appliquant le sous-cyclage local à chaque cellule, nous sommes en mesure de traiter la partie collisionnelle de l'équation de Vlasov-Fokker-Planck relative aux particules rapides par une méthode explicite. Cette stratégie explicite épouse la dynamique naturelle

du système sans engendrer des temps de calcul prohibitifs. Afin d'illustrer l'efficacité de l'algorithme LSE, on représente sur la Fig. (6.6) une carte du nombre de sous-cyclages à effectuer $\text{nsplit}_{jk}^\theta$ et nsplit_{jk}^v définis par (6.43) et (6.44) dans tout le maillage en vitesse suprathermique. On considère deux points de l'espace physique correspondant au combustible DT d'une capsule de FCI typique considérée 1 ns avant la stagnation. On remarque que le sous-cyclage est plus coûteux dans la coquille dense de la capsule (regroupant l'essentiel de la masse du combustible) que dans le point chaud. La forte densité et la faible température de la coquille de combustible impliquent en effet des pas de temps locaux plus petits, et donc un plus grand nombre de sous-cyclages pour avancer les cellules sur un intervalle de temps donné.

Par ailleurs, si l'on considère la carte du nombre de sous-cyclages à effectuer pour la direction θ , représentée en bas de la Fig. (6.6), on observe que le sous-cyclage a essentiellement lieu dans les cellules centrales, de taille $v_j \delta \theta$ plus petite, et donc associées à un pas de temps local plus faible. Pour les cellules plus à l'extérieur, le sous-cyclage n'est presque plus nécessaire. De façon plus quantitative, considérons une zone de l'espace physique correspondant à la coquille de combustible dense caractérisée par une densité électronique $n_e \sim 10^{24} \text{ cm}^{-3}$ (4 g.cm⁻³). Durant le processus d'implosion, la densité augmente, pouvant atteindre des valeurs cent fois plus élevées. Le schéma explicite requiert alors des pas de temps plus petits, plus de sous-cyclages sont en effet requis (~ 20 sous-cyclages lorsque $n_e \sim 10^{26} \text{ cm}^{-3}$ (400 g.cm⁻³), ce qui correspond à l'étape la plus critique en terme de temps calcul). Toutefois, malgré l'augmentation du nombre de sous-cyclages, l'approche n'engendre pas des coûts calcul prohibitifs, notamment parce que la majeure partie des calculs reste *localisée* dans une petite zone centrale de l'espace des vitesses. Ceci peut se montrer plus rigoureusement par une analyse de la complexité du code complet (voir section 6.13).

6.8 Advection de la composante suprathermique

Nous passons maintenant à la résolution de la partie Vlasov de l'équation (6.25), à savoir :

$$\frac{\partial f_\alpha^{ST}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f_\alpha^{ST} + \frac{\vec{\mathcal{E}}_\alpha}{A_\alpha} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{v}} f_\alpha^{ST} = 0. \quad (6.46)$$

On traite séparément les étapes de transport et d'accélération. On expose ici la méthode de résolution de la phase de transport des particules rapides. Pour une vitesse v fixée, le transport dans l'espace physique inhomogène est modélisé par :

$$\frac{\partial f_\alpha^{ST}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f_\alpha^{ST} = 0, \quad (6.47)$$

dont on connaît la solution exacte :

$$f_\alpha^{ST}(\vec{r}, \vec{v}, t + \Delta t) = f_\alpha^{ST}(\vec{r} - \vec{v} \Delta t, \vec{v}, t). \quad (6.48)$$

Comme pour l'advection de la composante thermique, on se propose de suivre une méthode des caractéristiques en ramenant la résolution de l'Eq. (6.47) à un problème d'interpolation de la solution exacte du problème de transport sur tout l'espace des phases. On

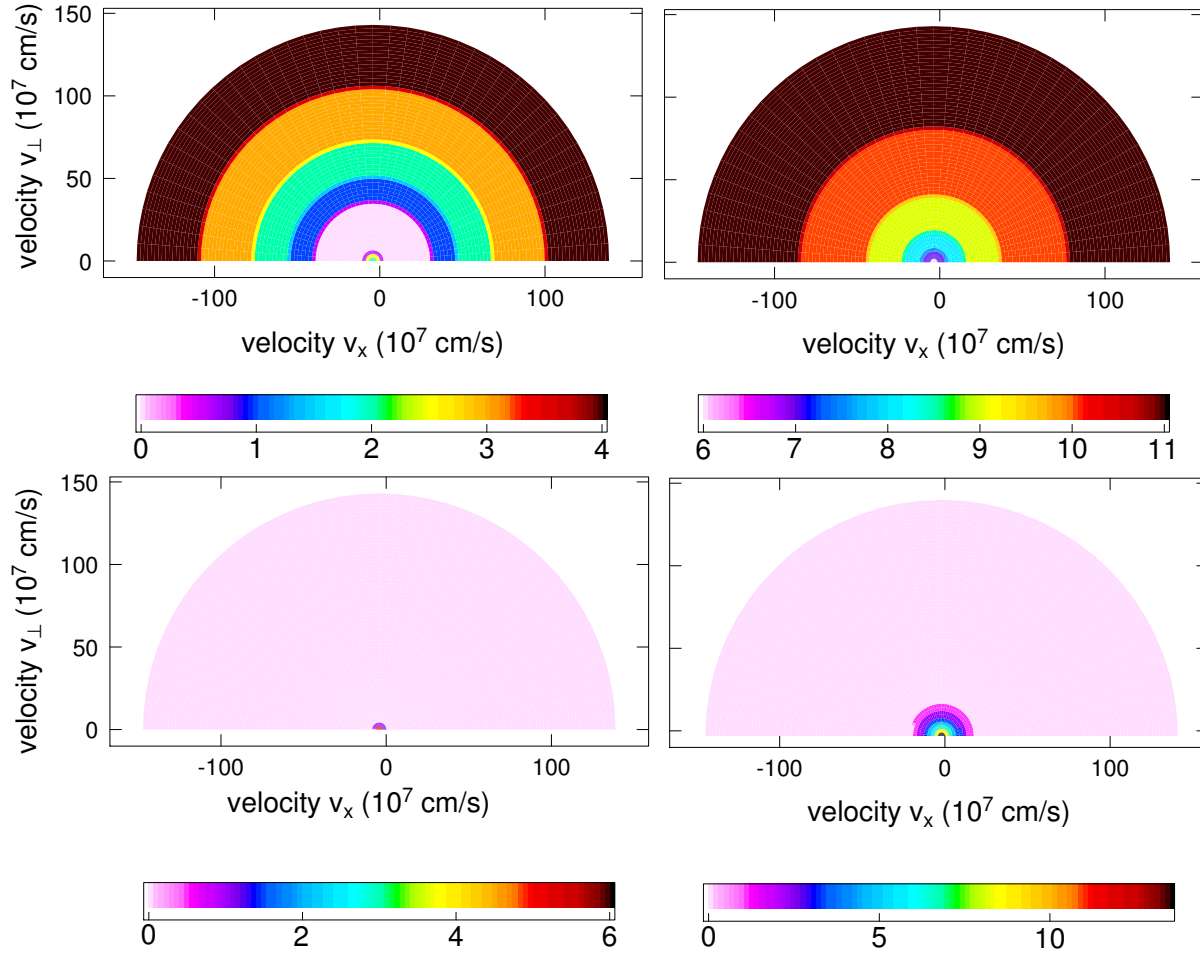


FIGURE 6.6 – Carte du sous-cyclage correspondant à l’algorithme LSE.

On représente la carte du nombre de dichotomies du pas de temps à effectuer localement dans chaque maille de la grille des vitesses suprathermiques afin d’assurer les conditions de stabilité. En haut, on représente $nsplit^v$ pour la direction radiale ; en bas, $nsplit^\theta$ pour la direction de l’angle polaire. Les cartes de dichotomies sont en outre représentées pour deux points de l’espace. Sur la gauche, on considère un point situé dans le point chaud de la capsule FCI considérée, où l’on a les conditions de densité et de température : $n_e \sim 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ et $T_i \sim T_e \sim 0.5 \text{ keV}$. Sur la droite, on choisit un point de la coquille de combustible dense, caractérisé par : $n_e \sim 10^{24} \text{ cm}^{-3}$ et $T_i \sim T_e \sim 0.01 \text{ keV}$. Ces conditions sont typiques d’une implosion de capsule FCI réaliste, considérée 1 ns avant stagnation. Le pas de temps global est ici $\Delta t = 0.1 \text{ ps}$.

part d'un point initial (r, v, θ) de l'espace des phases, où v, θ désignent les composantes polaires de la vitesse prise sur la grille suprathermique. Il s'agit de calculer les coordonnées du point d'arrivée après l'advection sur un pas de temps Δt . On opère tout d'abord une projection de la vitesse initiale sur la base cylindrique des vitesses, afin de calculer la transformation plus simplement. Comme la grille de vitesse suprathermique est centrée sur la vitesse moyenne V_0 , les coordonnées cylindriques de la vitesse initiales s'écrivent :

$$v_r = V_0 + v \cos \theta, \quad v_\perp = v \sin \theta. \quad (6.49)$$

On applique alors la transformation suivante, correspondant à l'advection du point initial r, v_r, v_\perp sur un pas de temps Δt :

$$\begin{aligned} r(t - \Delta t) &= [r(t)^2 - 2r(t)v_r(t)\Delta t + v^2\Delta t^2]^{1/2}, \\ v_r(t - \Delta t) &= \frac{r(t)v_r(t) - v^2\Delta t}{r(t - \Delta t)} \\ v_\perp(t - \Delta t) &= \frac{r(t)v_\perp(t)}{r(t - \Delta t)}, \end{aligned} \quad (6.50)$$

cela nous donne les coordonnées du point advecté dans l'espace des phases.

Pour effectuer l'interpolation en espace, on cherche les deux rayons successifs r_{i_0} et r_{i_0+1} du maillage spatial tels que $r_{i_0} \leq r(t - \Delta t) \leq r_{i_0+1}$. Ensuite, en chacun des nœuds ainsi trouvés, on effectue une interpolation en vitesse, en se basant sur le maillage en vitesse suprathermique local à chaque nœud. La grille de vitesse est en particulier centrée sur la vitesse moyenne $V_0(r)$ qui dépend de l'espace. Plus précisément, on calcule :

$$v(t - \Delta t) = [(v_r(t - \Delta t) - V_0(r_i))^2 + v_\perp^2(t - \Delta t)]^{1/2}, \quad \theta(t - \Delta t) = \cos^{-1} \frac{v_r(t - \Delta t)}{v(t - \Delta t)}, \quad (6.51)$$

pour $i = i_0$ et $i = i_0 + 1$.

On interpole alors la forme continue (6.51) sur les nœuds du maillage en vitesse suprathermique centré sur $V_0(r_i)$, par un simple méthode d'interpolation linéaire. Cela nous donne les points advectés :

$$f_{i_0} = f_\alpha^{ST}(r_{i_0}, v(t - \Delta t), \theta(t - \Delta t), t - \Delta t), \quad f_{i_0+1} = f_\alpha^{ST}(r_{i_0+1}, v(t - \Delta t), \theta(t - \Delta t), t - \Delta t). \quad (6.52)$$

La dernière étape correspond à une interpolation cubique par rapport à l'espace :

$$\begin{aligned} f_\alpha^{ST}(r(t - \Delta t), v(t - \Delta t), \theta(t - \Delta t), t - \Delta t) &= f_{i_0} + p\delta r \left. \frac{\partial f}{\partial r} \right|_{i_0} \\ &+ p^2 \left[3\delta f - \delta r \left(2 \left. \frac{\partial f}{\partial r} \right|_{i_0} + \left. \frac{\partial f}{\partial r} \right|_{i_0+1} \right) \right] \\ &+ p^3 \left[\delta r \left(\left. \frac{\partial f}{\partial r} \right|_{i_0} + \left. \frac{\partial f}{\partial r} \right|_{i_0+1} \right) - 2\delta f \right] \end{aligned}$$

$$\text{avec } \delta r = r_{i_0+1} - r_{i_0}, \quad p = \frac{r(t - \Delta t) - r_{i_0}}{\delta r}, \quad \delta f = f_{i_0+1} - f_{i_0}.$$

Dans cette interpolation spatiale, les gradients en espace $\frac{\partial f}{\partial r}(r = r_{i_0})$ sont évalués par différences finies. Les pentes sont limitées pour éviter l'apparition de nouveaux extremas entre les points de discrétisation, cela pouvant conduire à des problèmes de positivité et de stabilité. Plus précisément, en appelant $u = \frac{r - \frac{r_{i_0} + r_{i_0+1}}{2}}{\delta r}$, et $\phi = \frac{f - \frac{f_{i_0} + f_{i_0+1}}{2}}{\delta f}$, on calcule des contraintes locales à appliquer aux pentes évaluées en chaque nœud de l'espace. Les contraintes sont telles qu'aucun nouvel extremum n'apparaisse dans l'intervalle $u \in [-1/2, 1/2]$, ou que la valeur ϕ_m d'un éventuel extremum de ϕ reste bornée dans $[-1/2, 1/2]$. Cette approche est assez semblable à ce qui est décrit dans la référence [28].

6.9 Accélération de la composante suprathermique

L'effet du champ électrique sur les particules rapides est modélisé par :

$$\frac{\partial f_{\alpha}^{ST}}{\partial t} + \frac{\vec{\mathcal{E}}_{\alpha}}{A_{\alpha}} \frac{\partial f_{\alpha}^{ST}}{\partial \vec{v}} = 0 \quad (6.53)$$

où le champ électrostatique effectif $\vec{\mathcal{E}}_{\alpha}$ est défini par l'équation (6.24). L'accélération peut être vue comme une advection dans l'espace des vitesses. On emploie donc une méthode de caractéristiques, semblable à celle mise en place pour résoudre la phase de transport. La situation est d'ailleurs plus simple ici, puisque seule l'interpolation en vitesse sur la grille suprathermique doit être considérée. Il n'y a pas ici de couplage entre les variables d'espace et de vitesse. On peut donc répéter la procédure d'interpolation en vitesse de manière indépendante dans chaque cellule spatiale.

6.10 Couplage multi-échelle thermique-suprathermique

Nous présentons dans cette section la stratégie numérique mise en place pour modéliser le couplage entre les deux composantes de la fonction de distribution des particules α . Ce processus est décrit par le système (4.12) établi dans la section 4.5.2.

6.10.1 Du point de vue des particules rapides

Au niveau des particules rapides, le couplage avec la composante thermique est modélisé par le troisième terme (6.26) du membre droite de l'équation (6.25). Ce terme conduit à une variation temporelle de la composante suprathermique donnée par :

$$\left. \frac{\partial f_{\alpha}^{ST}}{\partial t} \right|_{ST \rightarrow T} = - \sum_i 4\pi \tilde{\Gamma}_{\alpha i} \frac{A_{\alpha}}{A_i} f_{\alpha}^{ST} f_i \simeq - \sum_i 4\pi \tilde{\Gamma}_{\alpha i} \frac{A_{\alpha}}{A_i} f_{\alpha}^{ST} n_i \delta^3(\vec{v}). \quad (6.54)$$

L'évolution temporelle de la composante suprathermique calculée dans les mailles centrales du maillage en vitesse est donc pilotée par :

$$\left. \frac{\partial f_{\alpha}^{st}}{\partial t} \right|_{\text{coll}} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial}{\partial v} (v^2 J^v) + \frac{1}{v \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta J^{\theta}) - \sum_i \tilde{\Gamma}_{\alpha i} \frac{A_{\alpha}}{A_i} f_{\alpha}^{ST} n_i \frac{\delta(v)}{v^2}, \quad (6.55)$$

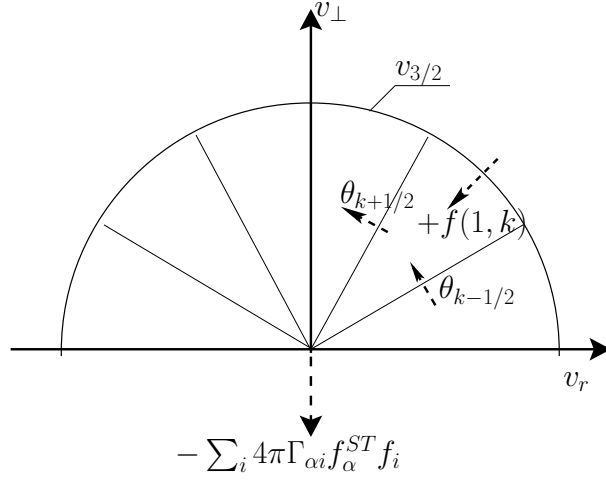


FIGURE 6.7 – Maillage central pour la grille de vitesse suprathermique.

où les courants de ralentissement J^v et J^θ sont données explicitement par (6.28) et (6.29) respectivement. Lorsque les particules initialement rapides deviennent modérément suprathermiques, leur vitesse s'approche de la zone thermique, et le courant de ralentissement transverse J^θ associé à la matrice de diffusion de l'opérateur de Fokker-Planck s'intensifie. La composante suprathermique a alors tendance à devenir isotrope dans la zone centrale du maillage en vitesse. Tenant compte du processus d'isotropisation, l'équation (6.55) se simplifie suivant :

$$\left. \frac{\partial f_\alpha^{st}}{\partial t} \right|_{\text{coll}} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial}{\partial v} (v^2 J^v) - \sum_i \tilde{\Gamma}_{\alpha i} \frac{A_\alpha}{A_i} f_\alpha^{ST} n_i \frac{\delta(v)}{v^2}, \quad (6.56)$$

où le courant radial de ralentissement J_v peut être estimé par :

$$J^v \simeq \tilde{\Gamma}_{\alpha i} \frac{A_\alpha}{A_i} \frac{n_i}{v^2} f_\alpha^{ST}.$$

On intègre alors l'équation (6.56) sur les mailles centrales ($j = 1, 1 \leq k \leq k_{\max}$) du maillage en vitesse suprathermique. L'évolution temporelle de la composante suprathermique en $j = 1$ est donc régie par (voir Fig. 6.7) :

$$\frac{f_{k1}^{n+1} - f_{k1}^n}{\Delta t} \frac{v_{3/2}^3}{3} = \sum_i n_i \tilde{\Gamma}_{\alpha i} (f_{k3/2}^n - f_{k1}^n). \quad (6.57)$$

Ce faisant, la composante suprathermique reste stable dans la zone centrale de l'espace des vitesses suprathermique.

6.10.2 Du point de vue de la composante thermique

La composante thermique f_α^T de la fonction de distribution des particules α est alimentée par la composante suprathermique f_α^{ST} . Cette technique de séparation des échelles est telle que la fonction de distribution complète $f_\alpha = f_\alpha^T + f_\alpha^{ST}$ vérifie l'équation de

Vlasov-Fokker-Planck initiale. La composante thermique évolue sur une grille en vitesse adaptée à l'échelle de vitesse thermique. Le maillage en vitesse thermique a donc une taille plus petite que la grille suprathermique et est caractérisé par un pas très fin, adapté à l'échelle de vitesse à traiter. Les fonctions de distribution des cibles thermiques D et T évoluent également sur cette grille. La paramétrisation de la grille thermique est effectuée en coordonnées cylindriques. Ce choix permet de répartir uniformément l'effort de discrétisation dans tout l'espace des vitesses (thermique), sans préjuger d'une forme particulière conduisant à privilégier une zone localisée de l'espace des vitesses. La composante thermique s'écrit donc $f_\alpha^T(r, v_r, v_\perp)$, v_r et v_\perp étant les composantes radiales et tangentielles de la vitesse, respectivement.

Le terme (6.26) soustrait de l'équation relative à la composante suprathermique réapparaît au niveau de l'équation définissant la composante thermique sous la forme d'un *terme source* : le ralentissement de la composante suprathermique induit l'alimentation de la composante thermique de sorte que le nombre de particules α se conserve bien dans la manœuvre :

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_\alpha^T}{\partial t} + v_r \frac{\partial f_\alpha^T}{\partial r} + \frac{v_\perp}{r} \left(v_\perp \frac{\partial f_\alpha^T}{\partial v_r} - v_r \frac{\partial f_\alpha^T}{\partial v_\perp} \right) + \frac{\mathcal{E}_\alpha}{A_\alpha} \frac{\partial f_\alpha^T}{\partial v_r} = \sum_i 4\pi \tilde{\Gamma}_{\alpha i} \frac{\partial}{\partial \vec{v}} \cdot \left(\frac{A_\alpha}{A_i} f_\alpha^T \frac{\partial \mathcal{S}_i}{\partial \vec{v}} - \nabla^2 \mathcal{T}_i \frac{\partial f_\alpha^T}{\partial \vec{v}} \right) \\ + \frac{1}{\tilde{\tau}_{e\alpha}} \frac{\partial}{\partial \vec{v}} \cdot \left((\vec{v} - \vec{u}_e) f_\alpha^T + \frac{T_e}{A_\alpha} \frac{\partial}{\partial \vec{v}} f_\alpha^T \right) + \sum_i 4\pi \tilde{\Gamma}_{\alpha i} \frac{A_\alpha}{A_i} f_\alpha^{ST} f_i. \end{aligned} \quad (6.58)$$

Remarque 6.10.1 En sommant les équations (6.58) et (6.25), on retrouve bien la forme initiale de l'équation de Vlasov-Fokker-Planck. Cela garantit que la stratégie de couplage mise en place assure la conservation de chaque moment associé à la fonction de distribution complète des particules α .

Le terme source provenant du ralentissement de la composante suprathermique est décrit par le dernier terme dans le membre droite de l'équation (6.58). Du point de vue de la composante thermique, la composante suprathermique f_α^{ST} apparaît quasi-constante sur l'ensemble du domaine en vitesse thermique. L'échelle de variation propre à la composante suprathermique est en effet plus grande que l'échelle de vitesse thermique. Il est donc légitime d'effectuer l'approximation suivante :

$$\sum_i 4\pi \tilde{\Gamma}_{\alpha i} \frac{A_\alpha}{A_i} f_\alpha^{ST} f_i \sim f_\alpha^{ST}(V_0) \sum_i 4\pi \tilde{\Gamma}_{\alpha i} \frac{A_\alpha}{A_i} f_i, \quad (6.59)$$

V_0 étant la vitesse ionique moyenne.

Remarque 6.10.2 Le terme source alimentant la composante thermique dépend de toutes les fonctions de distribution thermiques associées aux espèces D, T et α .

Nous passons maintenant au traitement numérique des électrons, décrits par une approche fluide.

6.11 Traitement des électrons

L'équation (3.30) gouvernant la température électronique, jointe à la relation de conservation du nombre d'électrons, conduit à l'équation suivante gouvernant la densité d'énergie électronique :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{3}{2} n_e T_e \right) + \mathbf{div} \left(\frac{3}{2} n_e u_e T_e \right) + n_e T_e \mathbf{div} u_e + \mathbf{div} Q_e = \\ = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{3}{2} n_e T_e \right)_{fric} + \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{3}{2} n_e T_e \right)_{rad} \end{aligned} \quad (6.60)$$

Cette équation rend compte de plusieurs mécanismes ayant une incidence sur la température électronique :

- la convection de l'énergie thermique par le champ de vitesse u_e ,
- le travail des forces de pression électronique au cours de cette convection
- la conduction thermique par l'intermédiaire du flux de chaleur Q_e .

Au second membre figurent par ailleurs des termes rendant compte d'autres mécanismes encore, tels que le chauffage par friction sur les ions et l'échange d'énergie avec le rayonnement. Chacun de ces mécanismes sera traité en particulier, en même temps que le mécanisme correspondant du point de vue des ions, ce qui permet d'assurer plus facilement le caractère globalement conservatif du système.

6.11.1 Convection des électrons

La partie convective du traitement des électrons, correspondant à la première partie de l'équation (6.60) gouvernant la densité d'énergie :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{3}{2} n_e T_e \right)_{conv} + \mathbf{div} \left(u_e \frac{3}{2} n_e T_e \right) = 0 \quad (6.61)$$

est traitée dans la routine d'advection des ions. On utilise le champ de vitesse u_e déduit des vitesses ioniques calculées dans cette routine pour convecter la densité initiale $n_e T_e$. La nouvelle température est obtenue à l'issue de la convection en divisant par la nouvelle densité n_e déduite des densités ioniques qu'on vient de calculer.

À cette occasion, on fixe également la température électronique à droite dans le cas d'une condition limite donnée par un Equilibre Thermodynamique Local (ETL) imposé à partir d'un fichier extérieur.

6.11.2 Travail des forces de pression et des forces électriques

Le travail des forces de pression et des forces électriques est modélisé par la seconde partie de l'équation (6.60) :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{3}{2} n_e T_e \right)_{pdv} + n_e T_e \mathbf{div}(u_e) = 0$$

qu'on peut mettre sous la forme d'une équation de conservation avec second membre :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{3}{2} n_e T_e \right)_{pdv} + \mathbf{div}(n_e u_e T_e) = u_e \frac{\partial P_e}{\partial r} \quad (6.62)$$

Sous cette deuxième forme, le second terme au premier membre représente bien la puissance par unité de volume des forces de pression électronique qui s'exercent sur les extrémités d'un élément de volume d'épaisseur δr et de section $S(r)$:

$$-\mathbf{div}(n_e u_e T_e) = \lim_{\delta r \rightarrow 0} \frac{S(r)P_e(r)u_e(r) - S(r + \delta r)P_e(r + \delta r)u_e(r + \delta r)}{S(r)\delta r}.$$

Le terme du second membre est la puissance par unité de volume développée sur les électrons par le champ électrique dont l'expression, en négligeant les corrections de friction, est (cf éq. (6.24)) :

$$\mathcal{E} = -\frac{1}{n_e} \frac{\partial P_e}{\partial r}.$$

Pour assurer la conservation globale de l'énergie, il est donc judicieux de traiter cette partie de l'équation électronique dans sa deuxième forme (6.62) en même temps que l'accélération des ions par le champ électrique. On reporte la variation d'énergie cinétique de ceux-ci sur l'énergie thermique des électrons (ce qui effectue le traitement du terme électrique au second membre de l'équation (6.62)), et en utilisant la forme en divergence du terme de travail des forces de pression (second terme du premier membre de l'équation (6.62)).

6.11.3 Conduction thermique électronique

La troisième partie de l'équation (6.60) :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{3}{2} n_e T_e \right)_{cond} + \mathbf{div} Q_e = 0 \quad (6.63)$$

représente l'effet de la conduction thermique. On utilise pour la traiter une méthode de type Cranck-Nicholson pour la discrétisation temporelle de l'opérateur de diffusion modélisant l'effet de la conduction thermique électronique. Une discrétisation spatiale standard des termes de l'équation de la chaleur conduit à un système tri-diagonal, que l'on inverse par une méthode de pivot. Le modèle de conduction thermique électronique employé est de type Spitzer, qui est a priori licite dans le contexte de l'étude cinétique du combustible DT¹⁶. Une condition limite de Dirichlet impose une température aux bords du domaine égale à sa valeur dans la dernière maille en contact avec ce bord. En géométrie sphérique, compte tenu que la section de cellule $S(r)$ s'annule au centre, ceci donne automatiquement la condition voulue de flux nul au centre.

16. L'hypothèse de Spitzer n'est pas toujours valable en FCI, par exemple pour traiter l'interaction entre le flux X et l'ablateur englobant le combustible. Dans cette zone, en particulier au voisinage des régions de fort gradient, la conductivité électronique peut présenter des effets *non-locaux* dont on ne peut rendre compte dans un modèle local de type Spitzer.

6.11.4 Autres mécanismes

Il reste à traiter les termes du second membre de l'équation (6.60) qui décrivent d'autres mécanismes (relaxation collisionnelle, ionisation, pertes radiatives) ; ces derniers termes, étant fondamentalement locaux mais pouvant éventuellement atteindre des amplitudes importantes, seront avantageusement incorporés au second membre de l'étape de conduction thermique, qui est traitée par un schéma implicite. En ce qui concerne la relaxation collisionnelle, elle est prise en compte dans l'étape de collisions décrite plus haut, puisque l'énergie gagnée par les ions y est retranchée aux électrons pour assurer la conservation globale de l'énergie.

6.12 Synthèse des algorithmes du code cinétique FUSE

On conclut ce chapitre dédié à la mise en œuvre numérique du modèle cinétique à deux échelles de vitesse. On récapitule l'enchaînement des différents algorithmes spécialement développés pour traiter le problème complet de la création, du transport, de l'accélération et de la relaxation collisionnelle des particules α , suivant une approche cohérente avec le traitement cinétique des ions thermiques. On montre en particulier comment les algorithmes relatifs aux particules rapides se couplent avec les méthodes numériques traitant les particules thermiques et les électrons. Cette séquence d'algorithmes forme la boucle principale de notre code cinétique FUSE. Pour un pas de temps global imposé Δt , nous suivons la procédure suivante :

- **Etape 1** – *Conductivité électronique*

On résout la partie conduction de l'équation électronique (6.63), ce qui se ramène à résoudre une équation de la chaleur, durant le temps $\Delta t/2$.

- **Etape 2** – *Accélération*

On accélère les fonctions de distribution thermiques associées aux espèces ioniques D, T, α sur le temps $\Delta t/2$. Dans le même temps, on résout la partie convective de l'équation électronique (6.61), de manière cohérente avec l'accélération. Cette méthode nous permet d'assurer la conservation globale de l'énergie des ions et des électrons. Ensuite, on accélère la composante suprathermique associée aux particules α .

- **Etape 3** – *Transport*

On effectue l'advection en espace des composantes thermiques pour chaque espèce ionique D, T, α , ainsi que le transport de la composante suprathermique. Cette première étape de transport est appliquée pendant la durée $\Delta t/2$.

- **Etape 4** – *Alimentation de la composante suprathermique*

La composante suprathermique est alimentée par les réactions de fusion, suivant le terme source donné par (4.2). La création de particules rapides est appliquée durant un pas de temps complet Δt .

- **Etape 5** – *Ralentissement des particules rapides*

On résout la partie collisionnelle de l'équation de Vlasov-Fokker-Planck (6.25) appliquée aux particules rapides. En particulier, on utilise l'algorithme Locally Sub-cycled Explicit (LSE) exposé précédemment. Cette phase est mise en œuvre durant un pas de temps complet Δt .

- **Etape 6** – *Alimentation de la composante thermique*

On applique le terme source (6.59) durant le pas de temps Δt . Cela correspond à l'alimentation de la composante thermique associée aux particules α , induite par le ralentissement des particules rapides.

- **Etape 7** – *Relaxation collisionnelle thermique*

On calcule l'évolution des fonctions de distribution thermiques (pour chaque espèce d'ions D, T, α) sous l'effet des collisions sur les ions et sur les électrons. Il s'agit d'un phénomène non-linéaire comme on prend en compte la relaxation des fonctions de distribution sur elles-mêmes. La méthode de résolution suit une approche de type Cranck-Nicholson avec un schéma Alternate Direction Implicit (voir section 6.3.4).

- **Etape 8** – *Transport*

On répète l'étape 3 pendant un pas de temps $\Delta t/2$.

- **Etape 9** – *Accélération*

On répète l'étape 2 pendant un pas de temps $\Delta t/2$.

- **Etape 10** – *Conduction électronique*

On répète l'étape 1 pendant un pas de temps $\Delta t/2$.

Après chaque modification des fonctions de distribution (composante thermique et suprathermique), les moments ioniques et les coefficients de ralentissement (pilotant la friction dynamique et la diffusion) sont remis à jour de manière cohérente.

6.13 Complexité algorithmique du code FUSE

On peut estimer la complexité algorithmique de l'approche multi-échelle proposée en vue de simuler numériquement l'implosion et la combustion de cibles FCI. Dans la méthode de calcul, l'étape la plus lourde d'un point de vue du temps CPU correspond à l'étape des collisions (thermiques ou suprathermiques). On cherche ainsi à estimer la complexité algorithmique des méthodes mises au point.

Considérons pour cela une durée de simulation Δt et un pas de temps global δt . Soit N la taille mémoire typique de la structure de données employée pour stocker l'ensemble des informations caractérisant l'état du système à un instant donné (le maillage spatial, les grilles en vitesse pour les deux composantes thermiques/suprathermiques locales à chaque maille d'espace, les fonctions de distribution thermiques pour chaque espèce, la composante suprathermique de la fonction de distribution des particules α , le profil spatial de température électronique, etc...).

Remarquons qu'il n'y a pas de condition CFL associée à la phase d'advection, résolue suivant une méthode des caractéristiques. En revanche, les algorithmes associés à la résolution des collisions sont assortis de conditions de stabilité numérique. Les collisions

à l'échelle suprathermique sont résolues par l'algorithme explicite LSE. Cette méthode est spécialement conçue pour le problème du ralentissement de l'échelle suprathermique et exploite les inhomogénéités en vitesse des termes de ralentissement. Les collisions à l'échelle thermique sont résolues par une méthode implicite usuelle de type ADI.

L'algorithme explicite LSE consiste en deux étapes :

- une phase de tri effectué sur les cellules de l'espace des vitesses suprathermiques,
- un sous-cyclage mis en œuvre conformément à un pas de temps local δt_i calculé pour chaque maille de la grille de vitesses suprathermiques.

La phase de tri, basée sur un algorithme de type Heapsort a une complexité moyenne valant :

$$\mathcal{N}_{op1} \sim \mathcal{O}\left(\frac{\Delta t}{\delta t} N \log N\right).$$

Le coût du sous-cyclage peut être évalué à partir des conditions de stabilité (6.35) avec l'ordre de grandeur suivant pour estimer le tenseur de diffusion dans une maille en vitesse v_i :

$$K(v_i) \sim \frac{v_i^2}{\tau_c(v_i)} \sim \frac{v_{max}^2}{\tau_c(v_{max})} \frac{v_{max}}{v_i},$$

où v_{max} est la vitesse maximale du maillage suprathermique, et $\tau_c(v)$ est le temps de collision. Ainsi, avancer la composante suprathermique f_α^{ST} sur un temps Δt requiert un nombre d'opérations $\mathcal{N}_{op2} \sim \sum_{i=1}^N \frac{\Delta t}{\delta t_i}$. On peut montrer (voir [52]) que $\mathcal{N}_{op2} \sim \mathcal{O}\left(\frac{\Delta t}{\tau_c(v_{max})} N^2\right)$.

La complexité algorithmique moyenne de l'étape de résolution des collisions sur la composante suprathermique est donc :

$$\mathcal{N}_{op}(\text{LSE}) \sim \mathcal{O}\left(\frac{\Delta t}{\tau_c(v_{max})} N^2\right).$$

Cette estimation est comparable au coût calcul de l'étape de collision propre à l'échelle thermique, basée sur un algorithme implicite de type ADI. Cette étape implique l'inversion d'une matrice creuse de taille $\mathcal{O}(N)$ avec $\mathcal{O}(\sqrt{N})$ diagonales non nulles. La complexité moyenne de la résolution des collisions thermiques est ainsi :

$$\mathcal{N}_{op}(\text{ADI}) \sim \mathcal{O}\left(\frac{\Delta t}{\delta t} N^2\right).$$

Ceci est proche de $\mathcal{N}_{op}(\text{LSE})$ tant que le pas de temps choisi n'est pas trop petit par rapport au temps typique de collision $\tau_c(v_{max})$.

En pratique, pour les simulations numériques effectuées sur des designs réalistes de cibles d'ignition FCI, on choisit $\delta t \sim 0.1$ ps. Ce choix correspond à l'ordre de grandeur du temps caractéristique de collision entre les particules α suprathermiques et les électrons, calculé dans les conditions thermodynamiques de la coquille de combustible dense. Cette échelle de temps est aussi plus grande que le temps de collision ion-ion typique. Un tel choix permet d'effectuer une simulation cinétique complète FUSE de l'implosion et de la

combustion d'une cible FCI sur un temps physique correspondant à 1 ns, en des temps CPU qui restent raisonnables. En pratique, le temps CPU des simulations cinétiques FUSE (allant jusqu'au bout du processus de combustion) est environ deux fois plus long qu'une simulation standard de type FPION, avec le même niveau de précision.

6.14 Validation du code FUSE sur quelques problèmes test de type FCI

Dans cette section, nous appliquons le code FUSE sur des problèmes simplifiés mais pertinents pour valider les résultats numériques du code FUSE dans des configurations de type FCI. On se focalise en particulier sur la partie du code relative au ralentissement des particules rapides et à leur couplage avec le plasma thermique jusqu'à la thermalisation complète du système. On considère des situations suffisamment simples pour disposer de résultats analytiques.

6.14.1 Ralentissement isotrope

Dans ce premier problème test, on considère la relaxation de particules α suprathermiques créées dans un plasma homogène et stationnaire, formé d'une seule espèce ionique moyenne $Z_i = 1, A_i = 2.5$ en interaction avec les électrons. La densité de référence est fixée à $n_i = n_e = 10^{22}$ particules/cm³, et la température à 1 keV. Les particules rapides sont injectées de manière isotrope dans l'espace des vitesses à l'énergie 3.52 MeV et à un taux constant S_0 (exprimé en particules.cm⁻³.s⁻¹). Du fait de l'homogénéité du plasma considéré, le ralentissement des particules rapides s'effectue de manière isotrope en vitesse durant tout le processus. Suivant notre approche multi-échelle, la fonction de distribution des particules α , $f_\alpha(v, t) = f_\alpha^{ST}(v, t) + f_\alpha^T(v_r, v_\perp, t)$ est solution du problème :

$$\begin{aligned} \partial_t f_\alpha^{ST} &= \Gamma_{\alpha i} \frac{n_i}{v^2} \partial_v f_\alpha^{ST} + \frac{1}{\tau_{\alpha e} v^2} \partial_v (v^3 f_\alpha^{ST}) - 4\pi n_i \Gamma_{\alpha i} f_\alpha^{ST} \frac{\delta(v)}{4\pi v^2} + \frac{S_0 \delta(v - v_h)}{4\pi v^2}, \\ \partial_t f_\alpha^T &= \partial_t f_\alpha^T|_{\alpha i} + \partial_t f_\alpha^T|_{\alpha e} + 4\pi \Gamma_{\alpha i} f_i f_\alpha^{ST}(0). \end{aligned} \quad (6.64)$$

$\partial_t f_\alpha^T|_{\alpha i}$ (resp. $\partial_t f_\alpha^T|_{\alpha e}$) correspond à la relaxation collisionnelle de la composante thermique de la fonction de distribution des particules α sur les ions thermiques (resp. électrons).

Dans ces conditions, les différentes échelles de vitesse du problème sont données par :

$$v_i^{th} \sim 3.0 \times 10^7 << v_c \sim 1.1 \times 10^8 << v_h \sim 1.3 \times 10^9 < v_e^{th} \sim 4.2 \times 10^9, \quad (6.65)$$

exprimées en cm/s. Pour $v > v_c$ (v_c donnée par Eq. (4.13)), le ralentissement des particules α est principalement dû aux collisions sur les électrons. La composante suprathermique $f_\alpha^{ST}(v, t)$ tend alors vers l'état stationnaire du problème suivant :

$$\partial_t f_\alpha^{ST} = \frac{1}{\tau_{\alpha e} v^2} \partial_v (v^3 f_\alpha^{ST}) + \frac{S_0 \delta(v - v_h)}{4\pi v^2}. \quad (6.66)$$

La solution stationnaire de ce problème est bien connue, donnée par exemple dans [26, 72] :

$$f_1(v) = \frac{S_0 \tau_{\alpha e}}{4\pi v^3} \mathcal{H}(v_h - v), v > v_c, \quad (6.67)$$

où v_h est la vitesse de création des particules α , $v_h \sim 1.3 \times 10^9$ cm/s, et \mathcal{H} est la distribution d'Heaviside.

On représente l'évolution de la composante suprathermique $f_\alpha^{ST}(v, t)$ calculée par le code FUSE à différents temps, ainsi que la solution analytique (6.67) correspondant à l'état stationnaire. Nous renvoyons à la figure 6.8. La solution numérique est en accord avec (6.67) tant que $v > v_c$. Lorsque $v < v_c$, les ions thermiques tendent à dominer la fin du ralentissement des particules modérément suprathermiques. La composante suprathermique, par construction solution de l'équation (6.64), tend alors vers l'état stationnaire, correspondant à une fonction de distribution quasi-constante sur tout le support des vitesses thermiques. Cette convergence est liée au retrait du terme $\propto f_\alpha^{ST} n_i \delta^3(\vec{v})$ effectué au niveau de l'opérateur de collisions appliqué à la composante suprathermique f_α^{ST} . Dans le même temps, la composante suprathermique alimente la composante thermique, le terme source étant proportionnel à $\propto f_\alpha^{ST}(v=0) f_i$. Une fois créée, la composante thermique évolue vers une distribution de Maxwell-Boltzmann, caractérisée par la densité totale n_α de particules α injectées dans le système, et la température de référence T_0 (que l'on maintient constante durant le processus de ralentissement) :

$$\mathcal{M}_\alpha(v) = n_\alpha \left(\frac{m_\alpha}{2\pi T_0} \right)^{3/2} \exp - \frac{m_\alpha v^2}{2T_0}. \quad (6.68)$$

La densité totale de particules α est donnée par :

$$n_\alpha = \int_0^{\tau_s} S_0 dt, \quad (6.69)$$

τ_s étant le temps correspondant à l'extinction du terme source.

La convergence vers la distribution Maxwellienne (6.68) est représentée sur la figure 6.8. Cette convergence a lieu sur la grille thermique, localisée sur le domaine des vitesses thermiques et finement discrétisé, adapté à l'échelle de vitesses des particules thermiques. La composante thermique associée aux particules α est alimentée par le terme $\propto f_i$, de largeur en vitesse $\sim \sqrt{T_0/m_i}$, et relaxe sur la grille thermique vers la distribution de Maxwell-Boltzmann (6.68) de largeur $\sim \sqrt{T_0/m_\alpha}$.

6.14.2 Relaxation anisotrope et instationnaire

On considère maintenant un problème test anisotrope. Pour forcer l'anisotropie, on définit un état initial très localisé en vitesse pour la composante suprathermique de la fonction de distribution des particules α . Plus précisément, on prend comme condition initiale :

$$f_\alpha^{ST}(v, \theta, t=0) = n_\alpha \frac{\delta(v - v_0)}{4\pi v^2} \delta(\cos \theta - \cos \theta_0), \quad (6.70)$$

avec $v_0 = v_h = 1.3 \times 10^9$ cm/s et $\theta_0 = \pi/4$.

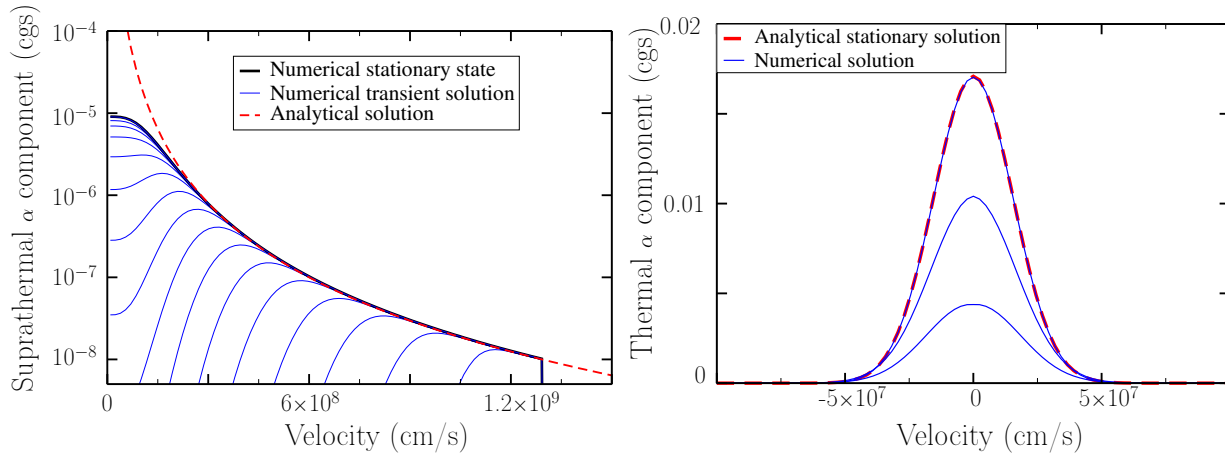


FIGURE 6.8 – Evolution temporelle de la fonction de distribution des particules α correspondant au cas test isotrope.

La fonction de distribution est ici représentée en unités cgs, en $\text{cm}^{-6}.\text{s}^3$. Le terme source alimentant la composante suprathermique de la fonction de distribution des particules α est artificiellement coupé après un temps $\tau_s = 1 \text{ ns}$. A gauche, on représente l'évolution temporelle de la composante suprathermique à des instants $t \leq \tau_s$. L'intervalle de temps entre deux courbes successives est 0.05 ns . La solution analytique est représentée en traits pointillés. A droite, on trace l'évolution temporelle de la composante thermique de la fonction de distribution des particules α à des temps d'observation $t \leq 4 \text{ ns}$. La composante thermique relaxe naturellement vers la distribution de Maxwell-Boltzmann.

A partir de cet état initial, on simule le ralentissement de la composante suprathermique sur les électrons et les ions thermiques du plasma. Comme dans le cas test précédent, le plasma thermique est homogène, formé d'une espèce ionique moyenne $Z_i = 1$, $A_i = 2.5$ en équilibre quasi-neutre avec les électrons. La température du plasma thermique est maintenue constante durant tout le calcul, fixée à 5 keV. Dans ces conditions, les échelles caractéristiques de vitesse sont données par :

$$v_{th,i} \sim 6.9 \times 10^7 \ll v_c \sim 2.4 \times 10^8 \ll v_h \sim 1.3 \times 10^9 < v_{th,e} \sim 9.4 \times 10^9, \quad (6.71)$$

exprimées en cm/s. L'évolution temporelle de la composante suprathermique est représentée sur la figure 6.9.

Lorsque $v > v_c$, les particules rapides transfèrent leur quantité de mouvement et leur énergie essentiellement sur les électrons. La fonction de distribution reste assez localisée dans l'espace des vitesses suprathermiques autour d'une vitesse caractéristique $v_b(t)$ qui décroît au cours du temps sous l'effet des collisions électroniques. La vitesse d'ensemble $v_b(t)$ ("bulk velocity" sur la Fig. 6.10) peut être calculée analytiquement [72] :

$$v_b(t) = [(v_0^3 + v_c^3) \exp -\frac{3t}{\tau_{\alpha e}} - v_c^3]^{1/3}. \quad (6.72)$$

La comparaison entre le code FUSE et la solution exacte de ce problème test est représentée sur la Fig. 6.10 et révèle un bon accord pour les vitesses suprathermiques, tant que $v > v_c$.

Lorsque $v \leq v_c$, le processus de diffusion en énergie et le courant transverse de diffusion créés par les ions thermiques deviennent importants. La fonction de distribution des particules α tend alors à s'isotropiser en commençant par s'étaler suivant la direction angulaire de l'espace des vitesses. L'isotropisation est liée au terme de diffusion dans l'opérateur de Fokker-Planck modélisant les collisions entre les particules rapides et les ions cibles thermiques. Cet effet s'intensifie lorsque $v \rightarrow 0$. Dans le même temps, lorsque $v \rightarrow 0$, la composante suprathermique alimente la composante thermique. Finalement, la composante thermique poursuit sa thermalisation jusqu'à atteindre un état stationnaire décrit par une distribution de Maxwell-Boltzmann, comme dans le problème test précédent.

6.14.3 Conservation de l'énergie et répartition du dépôt

Le modèle discrétisé écrit sous une forme conservative (6.32) assure précisément la conservation de la masse, mais la conservation de l'énergie n'est pas strictement vérifiée. L'élaboration d'un schéma discret pour l'opérateur de Fokker-Planck conservant rigoureusement l'énergie est un problème délicat, abordé par exemple dans [17], [54]. Pour contourner cette difficulté, on a recours à une approximation : on reporte la variation d'énergie totale ionique $\Delta(\sum_i W_i)$ calculée lors de l'étape de collisions sur l'énergie électronique, ce qui assure la conservation d'énergie au niveau global. Pour contrôler cette approximation, on vérifie en particulier qu'elle ne biaise pas la répartition du dépôt d'énergie des particules α entre les ions thermiques et sur les électrons. On considère pour cela deux problèmes tests de relaxation collisionnelle, partant d'un même état initial correspondant à une fonction de distribution suprathermique isotrope. La composante suprathermique se ralentit alors sur les électrons et les ions thermiques.

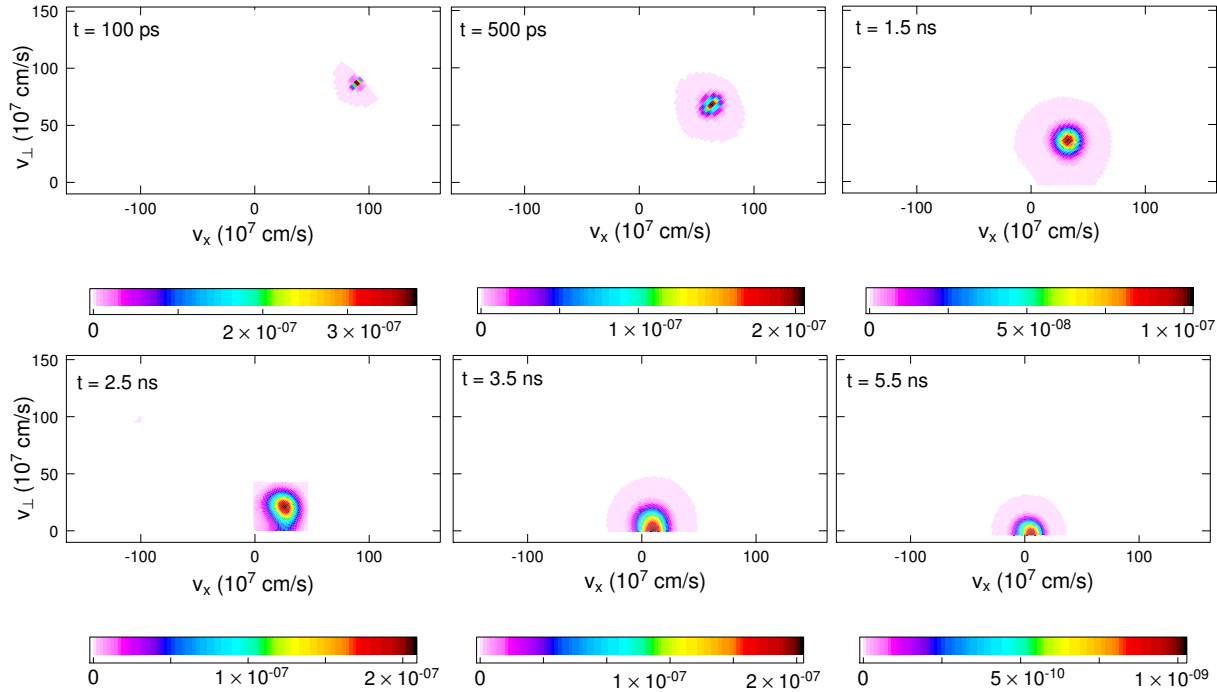


FIGURE 6.9 – Fonction de distribution des α (composante suprathermique) pour le problème test d'une relaxation collisionnelle.

On représente ici les instants finaux de la relaxation collisionnelle. Les valeurs de la fonction de distribution sont en unités cgs.

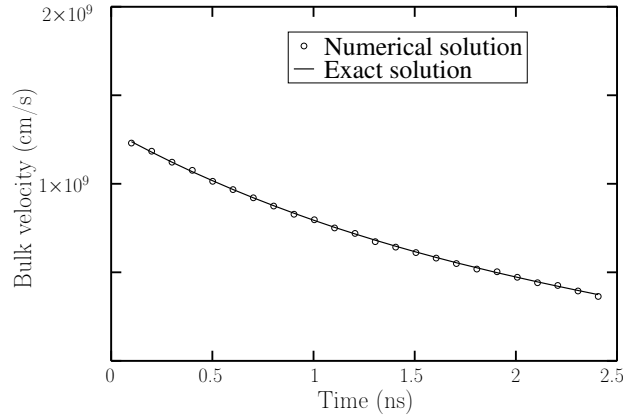


FIGURE 6.10 – Evolution temporelle de la vitesse correspondant au maximum de la fonction de distribution des α (composante suprathermique) pour le cas test d'une relaxation collisionnelle anisotrope.

- Dans le premier cas test, que l'on désigne par "Relax 1" sur la Fig. 6.11-gauche, on considère la relaxation collisionnelle complète des particules α naturellement calculée sur les ions thermiques et sur les électrons. On décrit alors l'ensemble du processus de thermalisation, aboutissant à un état stationnaire représenté sur la Fig. 6.11-gauche. Les courbes de température traduisent la phénoménologie suivante : au départ, les particules rapides sont principalement freinées par les électrons, qui do-

minent le ralentissement tant que $v > v_c$. La température électronique augmente (voir Fig. 6.11-en haut à gauche) . Puis, sous l'effet de la relaxation collisionnelle entre les ions thermiques et les électrons, la température ionique moyenne augmente à son tour. Enfin, lorsque les particules évoluant à l'échelle suprathermique atteignent le domaine thermique, il se forme une composante thermique pour les particules α qui interagit avec l'ensemble des espèces thermiques et les électrons jusqu'à la thermalisation complète du système. On vérifie alors que la masse totale des particules α suprathermiques et thermiques se conserve bien dans le processus (à une erreur numérique près de l'ordre du pourcent liée à la taille finie du maillage suprathermique). La conservation de l'énergie totale entre l'état initial et l'état final stationnaire est également vérifiée, à 1% près.

- Dans le second problème test, appelé "Relax 2", on étudie la répartition de l'énergie des particules rapides sur les électrons et les ions thermiques, respectivement. Pour ce faire, *on coupe artificiellement l'effet de la relaxation collisionnelle entre les électrons et les ions thermiques*. Les électrons et les ions thermiques ne sont donc chauffés que par l'effet du ralentissement des particules rapides. Les courbes de température et de densité de particules α (thermiques, suprathermiques) correspondantes sont représentées sur la Fig. 6.11-droite. En particulier, la température électronique reste toujours supérieure à la température ionique puisque la relaxation collisionnelle ions thermiques/électrons est volontairement ignorée (voir Fig. 6.11-en haut à droite). Cette stratégie nous permet alors de mesurer précisément la quantité d'énergie déposée sur les ions thermiques et sur les électrons. On reproduit alors ce cas test pour différentes valeurs de température électronique initiale. On peut alors comparer la fraction de l'énergie des α déposée sur les électrons $f_e(T_e)$ telle que calculée par le code cinétique FUSE, avec l'estimation théorique [27, 5] $f_e(T_e) \sim \frac{32}{32 + T_e(\text{keV})}$, cohérente avec le code fluide FCI1. Les résultats sont indiqués dans le tableau 6.1. On trouve ainsi un bon accord entre FUSE et FCI1, ce qui valide notre méthode approchée pour conserver l'énergie du système au niveau discret.

TABLE 6.1 – Fraction de l'énergie portée par les particules suprathermiques sur les électrons.

Les valeurs correspondent au problème test "Relax 2" dans lequel la relaxation collisionnelle entre les électrons et les ions thermiques est ignorée. Différentes températures électroniques initiales sont également envisagées.

$T_e(\text{keV})$	$f_e(T_e)$ -Fluide (FCI1)	$f_e(T_e)$ -Cinétique (FUSE)
5	0.86	0.81
10	0.76	0.73
15	0.68	0.65
20	0.61	0.63
50	0.39	0.40

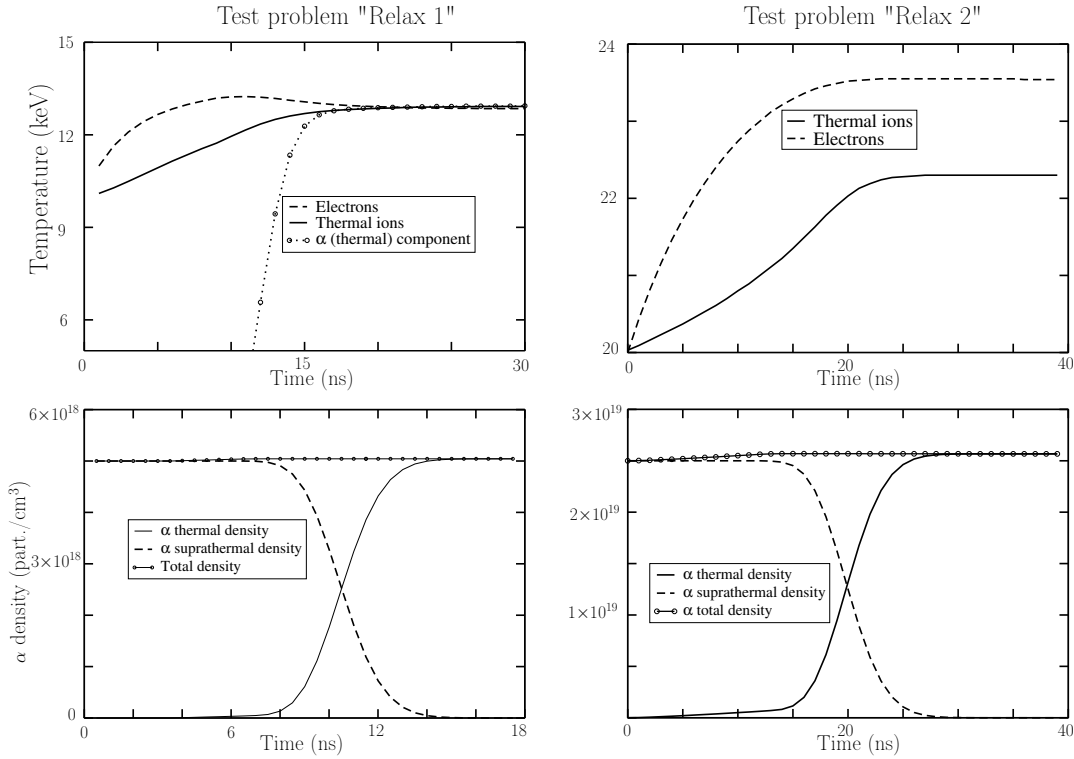


FIGURE 6.11 – Evolution temporelle des températures ioniques et électroniques, ainsi que de la densité de particules α pour deux cas test de relaxation collisionnelle.

En haut : températures ioniques et électroniques en fonction du temps ; en bas : densité de particules α en fonction du temps. Dans le calcul "Relax 1" (correspondant aux figures de gauche), la relaxation collisionnelle entre les électrons et les ions thermiques est prise en compte. On arrive ainsi à un état stationnaire correspondant à la thermalisation complète du système. Dans le problème test nommé "Relax 2" (correspondant aux figures de droite), la relation collisionnelle entre les électrons et les ions thermiques est artificiellement et volontairement ignorée. Ceci permet d'isoler la contribution du dépôt d'énergie portée par les particules α suprathermiques. Dans ce cas test, les électrons et les ions thermiques sont en effet exclusivement chauffés sous l'effet du ralentissement des particules α suprathermiques. Dans les deux cas, la densité électronique est fixée à $n_0 = 10^{22} \text{ cm}^{-3}$.

Ces problèmes test valident les algorithmes du code relatifs à la modélisation de la relaxation collisionnelle des particules suprathermiques. Ils montrent en particulier que :

- La conservation de la masse et de l'énergie sont bien assurées au niveau discret,
- Le dépôt d'énergie portée par les particules α rapides sur les électrons et sur les ions thermiques est cohérent avec les estimations fluides.

Aussi, l'approche multi-échelle adoptée permet de garder des temps calculs raisonnables, rendant possible la simulation numérique de situations réalistes d'implosion et de combustion de cibles de FCI avec une modélisation cinétique précise des ions thermiques et des produits de fusion. Ceci fait l'objet du chapitre suivant où l'on présente les résultats des simulations cinétiques d'une configuration typique de cible de FCI. Les écarts par

rapport à un calcul fluide de référence seront aussi exposés et interprétés en détail.

7

Analyse de l'implosion et de la combustion de cibles FCI au niveau cinétique

Sommaire

7.1	Introduction et motivation	237
7.2	Originalité de l'approche cinétique proposée	238
7.3	Configuration de cible étudiée	239
7.4	Pertinence de l'approche cinétique ionique multi-échelle	241
7.5	Performances intégrées du combustible DT	242
7.5.1	Puissance thermonucléaire et masse surfacique	242
7.5.2	Conditions thermodynamiques centrales	243
7.5.3	Sensibilité du calcul cinétique à la masse de l'ablateur	244
7.6	Effets cinétiques durant la phase d'implosion	245
7.7	Effets cinétiques pendant la phase de combustion	253
7.7.1	Mise en évidence d'un précurseur cinétique	253
7.7.2	Structure de la flamme de combustion	257
7.7.3	Perturbation cinétique des flux de chaleur ioniques	258
7.8	Le processus de combustion au niveau cinétique	259
7.9	Synthèse et perspectives	263

7.1 Introduction et motivation

Dans ce chapitre, on applique la modélisation cinétique à deux composantes d'énergie à une configuration réaliste de cible FCI.

Pour mesurer l'importance des effets cinétiques, on procède à une comparaison avec un code fluide de référence (FCI1) [16], en considérant la même configuration de cibles et en se plaçant dans des conditions de calcul identiques.

L'approche cinétique à deux échelles d'énergie mise en place dans le code FUSE nous permet de simuler finement le fonctionnement complet du combustible en des temps raisonnables : en parallélisant (par multi-threading) la phase de résolution des collisions, résolue dans chaque cellule spatiale indépendamment des mailles voisines, on arrive à simuler l'ensemble du combustible pendant 1 ns en ~ 10 heures de temps CPU. Cela nous permet d'effectuer plusieurs variations pour bien analyser les résultats de simulation.

Au niveau du code fluide, le transport des particules α est modélisé par une approche de type diffusion multi-groupe. Rappelons que cette approche est a priori licite si le libre parcours des collisions est petit devant l'échelle de longueur caractéristique du système (ici, le rayon de la capsule). Si cette condition est bien satisfaite pour les particules thermiques (par exemple, les ions D et T à la stagnation du point chaud), cela ne s'applique pas aux produits de fusion pour lesquels le libre parcours est du même ordre de grandeur que le rayon de la capsule.

De manière générale, l'approche fluide traite de manière approchée l'ensemble des effets cinétiques qui pourraient se produire pendant l'implosion et la combustion : en particulier, la conduction ionique n'est pas décrite précisément, au mieux suivant une formulation locale de type Spitzer-Braginskii [79, 13]. Aussi, la viscosité ionique est en général négligée, remplacée par une "pseudo-viscosité" numérique qui améliore la robustesse du calcul, notamment pour simuler les structures de choc. Enfin, la thermalisation des particules α n'est en général pas modélisée dans le détail : la stratégie usuelle consiste à injecter artificiellement les particules α ralenties en dessous d'une certaine vitesse seuil dans le bain thermique. Cette méthode introduit une coupure artificielle et ne peut décrire rigoureusement la phase finale de ralentissement des particules α et la manière avec laquelle elles interagissent avec les ions thermiques.

La modélisation cinétique complète mise en place dans le code traite l'ensemble de la capsule au niveau des fonctions de distributions $f_i(r, \vec{v}, t)$ pour chaque espèce d'ions (D, T α). L'ensemble des effets cinétiques pouvant se développer pendant les phases d'implosion et de combustion sont alors pris en compte de manière naturelle. Cette approche est donc susceptible de mettre en évidence une nouvelle physique par rapport aux résultats de la simulation fluide.

Ce chapitre reprend des éléments de la publication [P4].

7.2 Originalité de l'approche cinétique proposée

L'idée d'aborder la phase de combustion au niveau cinétique n'est pas nouvelle. Elle est par exemple mentionnée dans la référence [69] où les auteurs tentent de modéliser au niveau cinétique des implosions conduisant à l'ignition. Le couplage entre les produits de fusion et le plasma thermique est traité de manière approchée : les ions D, T sont modélisés par un fluide moyen. Aussi, la méthode utilisée pour simuler la thermalisation des particules α n'est pas décrite. On peut supposer que les particules α ralenties en dessous d'une certaine vitesse fixée artificiellement sont ignorées. Les configurations de cibles traitées sont aussi simplifiées : les auteurs considèrent des sphères nues qui se détendent dans le vide. Différentes densités surfaciques et températures centrales sont envisagées dans les simulations. Une méthode de type Monte Carlo est utilisée pour simuler le transport des

produits de fusion suprathermiques. Le traitement Monte Carlo du transport est comparé à des approches simplifiées de type diffusion ou dépôt local. Les profils spatiaux de température et de densité sont significativement modifiés. Dans certains cas ($\rho R \leq 1 \text{ g.cm}^{-2}$ et $T \leq 10 \text{ keV}$), les simulations Monte Carlo conduisent à une réduction importante de la fraction de combustible brûlée. Nous verrons que ceci corrobore les résultats de nos simulations cinétiques, où le transport des produits de fusion est modélisé de manière déterministe et où le couplage avec le bain thermique est simulé plus précisément. Une approche analytique a été présentée dans les références [34, 35] en complément de simulations cinétiques proches de celles de la référence [69]. Les auteurs décrivent le dépôt des produits de réaction de façon cinétique, et analysent en détail le rôle des différents mécanismes de transfert d'énergie au cours du développement de l'onde de combustion dans une cible de fusion. Il en ressort que le début de la propagation de l'onde de combustion est essentiellement pilotée par le chauffage lié aux produits de fusion. La conduction électronique tend à devenir plus importante dans la phase finale. Dans la phase de propagation, la vitesse de l'onde est grande devant les vitesses hydrodynamiques, puis lorsque l'onde a traversé le combustible on assiste à une décompression rapide de la cible, de sorte que l'essentiel du dégagement d'énergie a lieu pendant la phase de propagation.

Dans nos simulations cinétiques, et par opposition aux travaux existants, les ions D,T sont traités au niveau cinétique (en prenant en compte une fonction de distribution pour chaque espèce ionique). Les particules α sont représentées par un ensemble de deux composantes thermique/suprathermique, conformément au formalisme multi-échelle exposé au chapitre 4. Les deux composantes vérifient une équation cinétique de type Vlasov-Fokker-Planck avec un terme supplémentaire de couplage multi-échelle. La fonction de couplage thermique/suprathermique mise en place numériquement découle naturellement de la forme de l'opérateur de Fokker-Planck et ne nécessite pas l'introduction d'un seuil d'énergie en dessous duquel les particules suprathermiques seraient ignorées. Aussi, les phases de transport et d'accélération des produits de fusion sont résolues de manière déterministe par une méthode de caractéristiques. Il s'agit donc d'une approche cinétique ionique complète et auto-consistante, appliquée à l'implosion et à la combustion de configurations réalistes de cibles de FCI.

7.3 Configuration de cible étudiée

La cible considérée dans les simulations est représentative des configurations actuellement expérimentées sur l'installation Américaine NIF (voir par exemple [60], [12]) en vue de l'atteinte de l'ignition. Plus précisément, on considère un combustible DT cryogénique de masse 0.25 mg déposée sur la surface interne d'une coquille en CH (dite ablateur ou poussoir) d'un millimètre de rayon interne. Ce schéma est aussi proche de celui exposé dans la référence [76] correspondant à une cible de fusion destinée au laser mégajoule.

Les principales caractéristiques de la simulation fluide sont les suivantes :

- la masse surfacique maximale du combustible est 1.7 g.cm^{-2} , atteinte au temps $t_1^f = 18340 \text{ ps}$, après le début du processus d'implosion.
- La combustion commence alors à cet instant, la puissance dégagée par les réactions de fusion atteint ensuite la valeur maximale $P_{th} \sim 2.5 \times 10^{18} \text{ W}$, au temps $t_2^f = 18360$

ps.

- L'énergie totale dégagée par les réactions de fusion est alors 19 MJ.

Décrivons maintenant la simulation cinétique, effectuée à l'aide de notre code FUSE. Le calcul cinétique commence au temps 17340 ps, après le début d'implosion, ce qui correspond à une nano-seconde avant la stagnation de la cible. A l'instant où le calcul cinétique est initialisé, le choc convergent se situe au milieu du point chaud, comme l'illustre le diagramme de marche associé au combustible représenté sur la Fig. 7.1.

Par ailleurs, le calcul cinétique mis en œuvre sur l'ensemble du combustible en implosion est multi-espèce : on introduit une fonction de distribution pour chaque espèce d'ions D, T et α . La fonction de distribution des particules α est aussi représentée par deux composantes, respectivement thermique et suprathermique. Le calcul multi-espèce ainsi mis en place se révèle donc être plus précis que celui de la référence [51] où une espèce moyenne de nombre de masse 2.5 était considérée.

L'implosion est pilotée par une condition limite qui impose la partie rentrante des fonctions de distribution thermiques à partir des moments hydrodynamiques relevées à l'interface DT/ablateur dans la simulation fluide. Remarquons d'ores et déjà que cette condition limite n'est licite que pendant la phase d'implosion et le début de la combustion. Lorsque le front de combustion atteint le bord du combustible, la condition limite en provenance de la simulation fluide risque de n'être plus cohérente avec le calcul cinétique. L'expansion du DT doit alors être calculée de manière cohérente avec la pression calculée par la simulation cinétique au niveau de la dernière maille de combustible. Aussi, une estimation de la masse d'ablateur restante est requise pour simuler l'explosion du combustible. Dans la pratique, on choisit une masse d'inertie permettant de bien reproduire la dislocation moyenne observée dans la simulation fluide dans laquelle l'ablateur est modélisé. Nous contrôlons cette approximation par une étude de la sensibilité du calcul cinétique vis à vis de la masse d'ablateur choisie.

Pour représenter d'une façon satisfaisante à la fois la coquille de combustible dense (où la simulation fluide est maillée plus finement) et la zone du point chaud central où le maillage est plus grossier, les rayons du maillage spatial suivent une progression géométrique de rayon 0.95 à partir de l'interface combustible/ablateur. De cette manière, le pas du maillage spatial δr décroît à partir de la valeur $\sim 20 \mu\text{m}$ au centre de la capsule pour atteindre une largeur inférieure au micron au niveau de la surface externe du combustible. L'espace des vitesses thermiques (v_r, v_\perp) est discrétisé sur 129×64 cellules, tandis que la grille polaire suprathermique (v, θ) est représentée par 100×60 cellules. Les tailles mémoire occupées respectivement par les deux composantes sont donc comparables. Enfin, le pas de temps global de référence est pris égal à 0.05 ps. On s'assure par une étude de sensibilité que les simulations cinétiques sont bien convergées vis à vis du pas de temps, du maillage spatial et du maillage en vitesse.

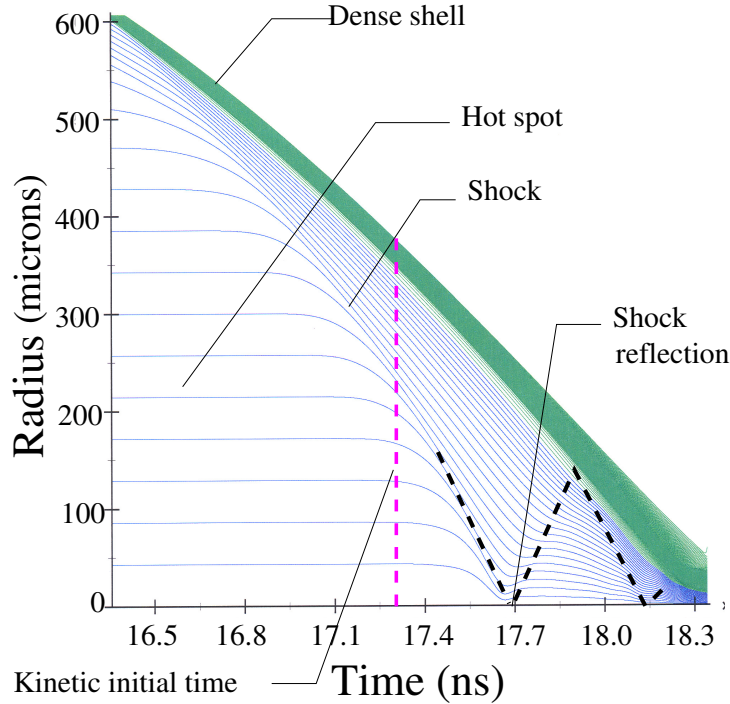


FIGURE 7.1 – Diagramme de marche du combustible DT en implosion.

Evolution temporelle du "rayon Lagrangien" des mailles de combustible ; on identifie la trajectoire de la coquille dense et celle du choc parcourant le point chaud. Au moment où le calcul cinétique est initialisé (à $t = 17340$ ps), le choc se trouve au milieu du point chaud.

7.4 Pertinence de l'approche cinétique ionique multi-échelle

Pour illustrer la pertinence de l'approche cinétique, tant pour les ions thermiques que pour les produits de fusion suprathermiques, on présente quelques estimations des temps et des longueurs caractéristiques de collision associées aux ions thermiques D,T à des instants particuliers d'une implosion réaliste d'une cible d'ignition. Ces estimations sont basées sur les formules de Braginskii [13] et sont données dans le Tableau 7.1. Trois instants particuliers sont considérés, correspondant respectivement à la post-convergence du choc, à la stagnation de la cible et au début du processus de combustion. Les conditions de température et de densité sont rappelées pour chaque phase considérée.

Les échelles collisionnelles sont ainsi telles que les effets cinétiques sont susceptibles de jouer un rôle important dans la région centrale choquée (qui se forme vers le temps ~ 17650 ps). Dans cette zone, le libre parcours de collision moyen est comparable à la taille du point chaud. Ainsi, l'approximation fluide n'est a priori pas valable pour les ions thermiques situées dans la zone centrale du point chaud, pendant et après la convergence du choc principal. Lorsque l'on se rapproche de l'interface point chaud/coquille dense, les temps de collision diminuent et les effets cinétiques tendent à disparaître : la limite

fluide devient alors applicable. Afin de modéliser précisément la phase de convergence du choc, une description cinétique des particules thermiques est donc pertinente. En outre, dans les schémas de cible FCI usuels, la capsule de DT est, à des instants proches du temps d'ignition, sous la forme d'un point chaud entourée d'une coquille dense contenant l'essentiel de la masse du combustible. Les réactions de fusion démarrent dans le point chaud caractérisé par une température élevée $T \sim 7\text{-}10$ keV et une densité faible $n_e \sim 10^{25}$ cm⁻³, tandis que la coquille de combustible dense est le siège d'une température plus faible $T \sim 0.7\text{-}1$ keV et une densité plus importante $n_e \sim 10^{26}$ cm⁻³. Dans de telles conditions, le transport des particules α suprathermiques est susceptible de présenter un caractère non-local, pouvant ainsi dévier de l'approche par un modèle de diffusion. Pour étudier rigoureusement de tels effets et leurs impacts potentiels sur la combustion des cibles, une modélisation complète et auto-consistante appliquée aux ions thermiques et aux produits de fusion se révèle donc nécessaire.

TABLE 7.1 – Echelles de temps et de longueur de collision associées aux ions thermiques du point chaud pendant l'implosion

Temps (ps)	T_i (keV)	T_e (keV)	n_e (cm ⁻³)	τ_i (ps)	λ_i (μ m)
17650	4	1	4×10^{21}	112	50
17650	2	1	4×10^{21}	45	14
17650	1	1	4×10^{21}	20	4
18120	8	4	10^{24}	1.7	1
18340	15	15	5×10^{25}	0.1	0.1

7.5 Performances intégrées du combustible DT

7.5.1 Puissance thermonucléaire et masse surfacique

On compare tout d'abord les performances intégrées du combustible, en traçant sur la Fig. 7.2 l'évolution temporelle de la puissance dégagée par les réactions de fusion, ainsi que l'évolution temporelle de la masse surfacique $\int \rho dr$ du DT. Les performances de la cible sont nettement plus faibles dans le calcul cinétique. En particulier :

- La puissance dégagée par les réactions de fusion dans le calcul cinétique est quatre fois plus faible que dans le calcul fluide. La largeur de la courbe de puissance - liée au temps de combustion - est aussi plus importante : ≈ 20 ps par rapport à ≈ 5 ps pour la simulation fluide. Il s'en suit une réduction importante de l'énergie thermonucléaire produite : seulement ~ 11 MJ ($\pm 20\%$) dégagés dans le calcul cinétique, comparée à ~ 19 MJ dans la simulation fluide de référence.
- La combustion commence également légèrement plus tôt (≈ 25 ps) dans le calcul cinétique, comme on peut le voir en observant la chronométrie des courbes de puissance.

- L'évolution temporelle de la masse surfacique est cohérente avec celle de la puissance dégagée par les réactions de fusion : $\int \rho_{DT} dr$ a tendance à augmenter plus vite dans la simulation cinétique, mais à atteindre une valeur maximale plus faible : $\rho R^{max} \sim 1.4 \text{ g.cm}^{-2}$, comparée à ~ 1.7 pour le calcul fluide. La fraction brûlée est par conséquent plus faible dans le modèle cinétique, ce qui est cohérent avec la réduction importante de l'énergie produite.

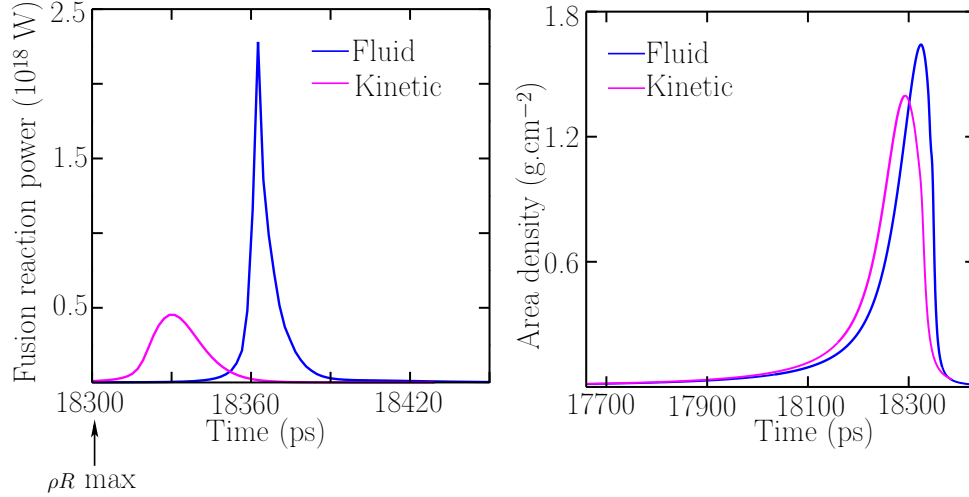


FIGURE 7.2 – Performances intégrées : puissance de fusion et masse surfacique. Comparaison de la puissance dégagée par les réactions de fusion (gauche) et de la masse surfacique totale du combustible (droite) entre le modèle fluide et cinétique.

7.5.2 Conditions thermodynamiques centrales

L'analyse des performances intégrées est confirmée par l'étude des conditions du point chaud central. En particulier, on considère les évolutions temporelles de la température ionique et pression totale calculée au centre du point chaud, représentées sur la Fig. 7.3. Le point chaud atteint des températures nettement plus faibles dans le calcul cinétique. La pression centrale suit la même dynamique et est largement plus faible que dans le calcul fluide. Ces deux quantités semblent atteindre le domaine d'ignition légèrement plus tôt dans le calcul cinétique. Ceci est cohérent avec les évolutions temporelles de la puissance dégagée $P_{th}(t)$ et de la masse surfacique $\int \rho dr$.

Les différences importantes observées sur les performances globales du combustible entre la simulation cinétique et le calcul fluide peuvent s'expliquer en considérant deux étapes principales, que l'on étudie en détail dans la suite :

- Durant le processus d'implosion, lorsque le choc principal converge vers le centre de la cible, des effets non-collisionnels commencent à se développer dans la zone choquée centrale, de telle sorte que la simulation cinétique se désynchronise du calcul fluide. Les effets cinétiques induisent un front de choc plus large et moins raide dans le calcul cinétique. La température centrale a par conséquent tendance à augmenter plus tôt dans le calcul cinétique. La différence de temps est toutefois relativement

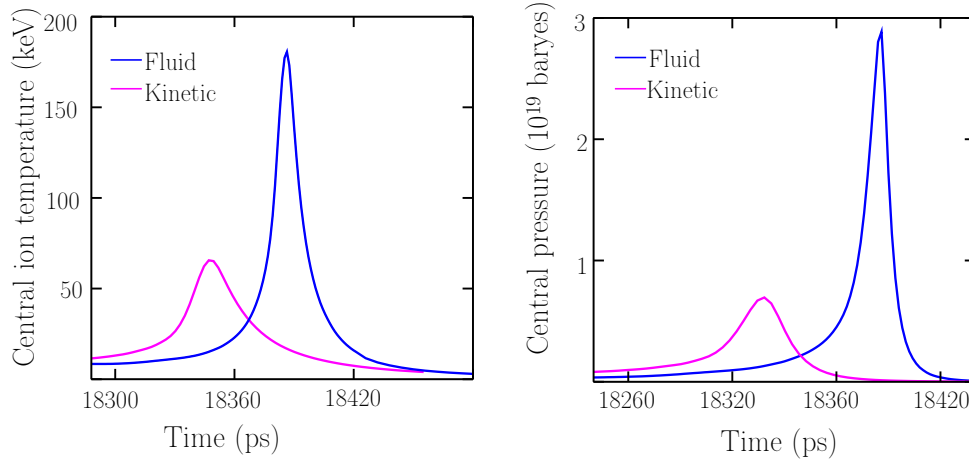


FIGURE 7.3 – Performances intégrées : températures et pressions centrales. Comparaison des conditions centrales du point chaud -température ionique (à gauche) et pression totale (à droite)- entre la simulation fluide et cinétique.

faible, de l'ordre de 25-30 ps (ce qui est petit par rapport à la durée totale de la simulation ~ 1000 ps).

- Le chauffage précoce du point chaud induit alors une ignition se produisant plus tôt dans le calcul cinétique, dans un combustible DT plus gros et moins comprimé. En outre, les effets cinétiques liés aux particules α perturbent de manière significative la structure de la flamme se propageant dans la coquille dense (voir par exemple Fig.7.16). Le front de combustion cinétique est en particulier moins localisé que dans le modèle fluide. Nous montrerons que ce phénomène est lié à l'effet du transport *non-local* des particules α , qui déposent leur énergie et leur quantité de mouvement en surface interne de la coquille du combustible dense, *en dehors du point chaud*.

7.5.3 Sensibilité du calcul cinétique à la masse de l'ablateur

Lorsque la flamme atteint le bord du combustible DT, la condition limite provenant du calcul fluide n'est plus nécessairement cohérente avec le calcul cinétique. On calcule alors la dislocation de la capsule à partir de la pression relevée dans la dernière maille de combustible. La pression de dislocation met en mouvement l'ablateur qui n'est pas décrit dans la modélisation cinétique. Pour simuler une expansion du combustible qui soit malgré tout représentative, on représente l'inertie de l'ablateur restant par une masse moyenne que l'on choisit pour reproduire une dislocation d'ensemble semblable à celle observée dans le calcul fluide. Nous sommes conscients que cette approximation quelque peu grossière de l'ablateur ne permet pas de modéliser finement ce qui se passe à l'interface combustible/ablateur. Toutefois, nous étudions ici le développement de la combustion au sein du combustible, de sorte que ce traitement moyen peut être suffisant pour atteindre notre but. Pour vérifier le bien fondé de cette méthode approchée, on effectue une série de calculs cinétiques complets en faisant varier la masse d'ablateur restante dans une plage physique. On trace sur la Fig. 7.4 les évolutions temporelles du rayon externe, et des puissances de fusion dégagées pour différentes masses d'ablateur. On montre ainsi

que les résultats de simulation ne dépendent pas de manière importante du choix de la masse moyenne représentant l'effet de l'ablateur sur la dynamique d'expansion, ce qui est rassurant. En particulier, les courbes de puissance représentées sur la Fig. 7.4-droite, restent dans le même ordre de grandeur. La variation induite sur l'énergie de fusion dégagée est de l'ordre de 20%, valeur que l'on prendra comme une estimation de l'incertitude sur l'énergie de fusion simulée par notre code cinétique. Pour aller plus loin dans la modélisation de l'interaction ablateur/combustible, il faudrait considérer l'ablateur en CH dans la simulation cinétique, ce qui peut se révéler très coûteux en raison du caractère très collisionnel de l'espèce C. Cela nécessite quelques adaptations à effectuer sur notre code. Cette question est discutée plus précisément dans l'annexe C consacrée aux extensions de la méthode.

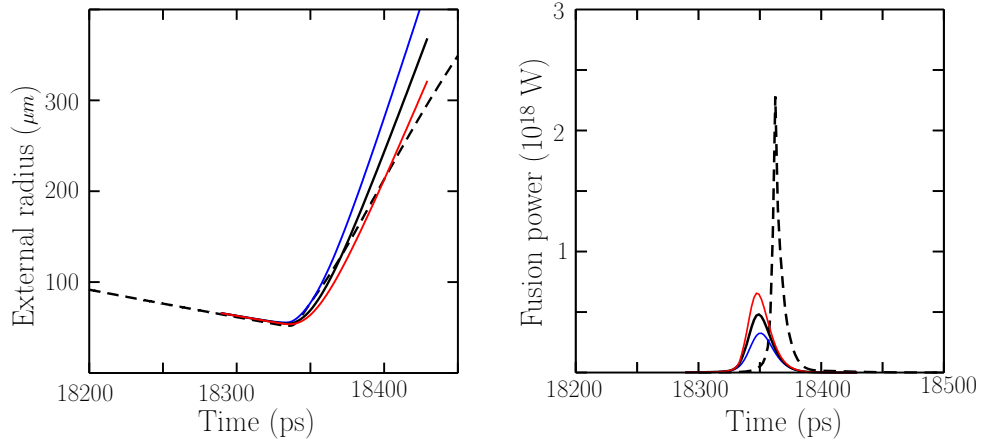


FIGURE 7.4 – Dislocation du combustible et puissance totale.

Sensibilités de la dislocation du combustible (représentée sur la figure de gauche) et de la puissance thermonucléaire de fusion (représentée à droite) par rapport à la masse d'ablateur employée dans les simulations cinétiques. Le calcul hydrodynamique de référence (incluant le poussoir) est représenté en pointillés noirs. La simulation cinétique de référence est tracée en traits pleins noirs. La courbe rouge (resp. bleue) correspond à un calcul cinétique où la masse de poussoir a été multipliée (resp. divisée) par deux. Ceci implique une variation d'environ 20 % sur l'énergie de fusion dégagée.

7.6 Effets cinétiques durant la phase d'implosion

Afin d'étudier les effets cinétiques pendant l'implosion, il est instructif de commencer par comparer les profils spatiaux de densité, de vitesse moyenne et de température calculés dans la simulation cinétique avec ceux issus du calcul fluide. On considère pour cela trois instants représentatifs de la phase d'implosion du combustible :

- A $t = 17500$ ps, peu avant la convergence du choc, on note un profil de choc plus large dans le calcul cinétique, comme l'illustre le profil spatial de densité représenté sur la Fig. 7.5. En particulier, le choc atteint le centre de la cible plus tôt que dans le calcul fluide.

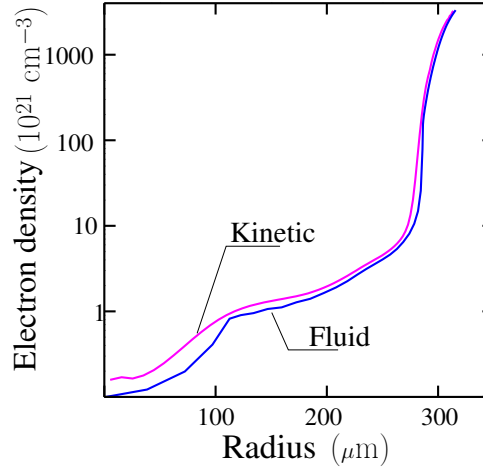


FIGURE 7.5 – Profils de densité avant la convergence du choc, à $t = 17500$ ps. Les effets cinétiques induisent un choc plus large ; la région centrale du point chaud monte alors en température plus rapidement dans le calcul cinétique.

- A $t = 17650$ ps, c'est à dire 310 ps après le début du calcul cinétique, les effets cinétiques induisent un écart visible sur les profils hydrodynamiques, particulièrement au niveau des profils spatiaux de température ionique-électronique. Le centre tend à être plus chaud et l'interface point chaud/coquille plus proche du centre dans le calcul cinétique.
- A $t = 18120$ ps, correspondant au voisinage de la phase de stagnation de la capsule, les écarts observés précédemment se confirment (voir Fig. 7.7). La zone de compression au niveau de l'interface point chaud-coquille dense a en effet tendance à se situer plus près du centre dans le calcul cinétique, comme le prouve le gradient de vitesse négatif dans la région située au rayon $r = 70 \mu\text{m}$ (voir Fig. 7.7-droite). Cet effet avait d'ailleurs déjà été obtenu avec le précédent code cinétique FPION [51]. Ce phénomène est lié à la perturbation du flux de chaleur ionique au niveau de l'interface point chaud/combustible dense. On remarque également que la température du point chaud central tend à augmenter plus rapidement dans le calcul cinétique. Le calcul cinétique commence ainsi à se désynchroniser du calcul fluide.

Remarque 7.6.1 L'approche cinétique de type Vlasov Fokker-Planck est a priori licite lorsque les logarithmes de Coulomb sont grands devant 1 (voir par exemple [77]). Pour s'assurer de la légitimité du modèle cinétique appliqué au combustible DT considéré dans des conditions réalistes de FCI, on représente sur la Fig. 7.8 les profils spatiaux des logarithmes de Coulomb au temps d'observation $t = 17650$ ps (même temps que la Fig. 7.6). On observe que la condition $\text{Log}\Lambda \gg 1$ est bien vérifiée dans le point chaud, mais pas dans la coquille dense, où le plasma est dégénéré et fortement couplé. Dans cette zone très collisionnelle, les logarithmes de Coulomb tendent à être négatifs. On impose alors une borne basse sur les logarithmes de Coulomb ($\text{Log}\Lambda > 1$), dans l'esprit de la référence [53]. Nous avons bien conscience qu'il s'agit d'une approximation quelque peu grossière, mais cela nous permet d'étendre de manière simple le domaine d'application du modèle cinétique dans la coquille dense. Cette région est de toutes façons très collisionnelle, et les

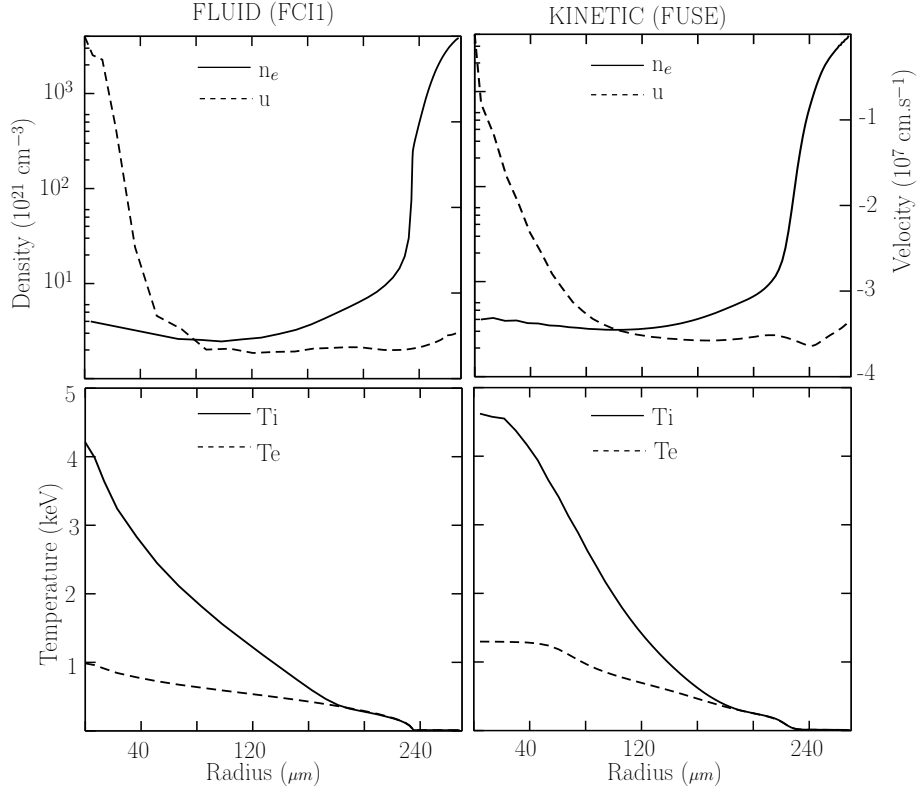


FIGURE 7.6 – Comparaison des résultats des simulations fluide et cinétique durant la phase d'implosion.

Profils de densité et de vitesse moyenne (en haut) et de températures électroniques-ioniques (en bas) tracés dans l'ensemble du combustible DT d'une cible d'ignition considérée au temps $t = 17650$ ps. Ce temps correspond à 310 ps après le début du calcul cinétique et approximativement 650 ps avant l'ignition. À gauche : simulation fluide (FCI1) ; à droite : calcul cinétique (FUSE).

fonctions de distribution restent proches des fonctions de distribution Maxwelliennes. Le traitement cinétique approché se révèle donc suffisant pour le problème étudié ici. D'un point de vue plus théorique, l'amélioration de la modélisation cinétique dans un plasma dense et couplé est un problème très général, abordé par exemple dans la référence [56]. Cette question sort quelque peu du présent travail et constitue une perspective d'étude future.

Nous étudions maintenant plus en détail la dynamique d'évolution de la température centrale dans le point chaud du combustible. Une comparaison fluide-cinétique de l'évolution temporelle de la température ionique centrale est représentée sur la Fig. 7.9-gauche. Cette figure révèle des différences entre les modèles fluide-cinétique importantes, en particulier au moment de l'arrivée du choc dans la zone centrale du point chaud. La variation de température associée a tendance à se produire plus tôt dans le calcul cinétique. Les variations temporelles sont aussi moins raides et plus étalées dans la simulation FUSE. Ainsi, à partir du même état initial, correspondant à 1 ns environ avant la stagnation de la capsule, les deux simulations fluide-cinétique se désynchronisent progressivement.

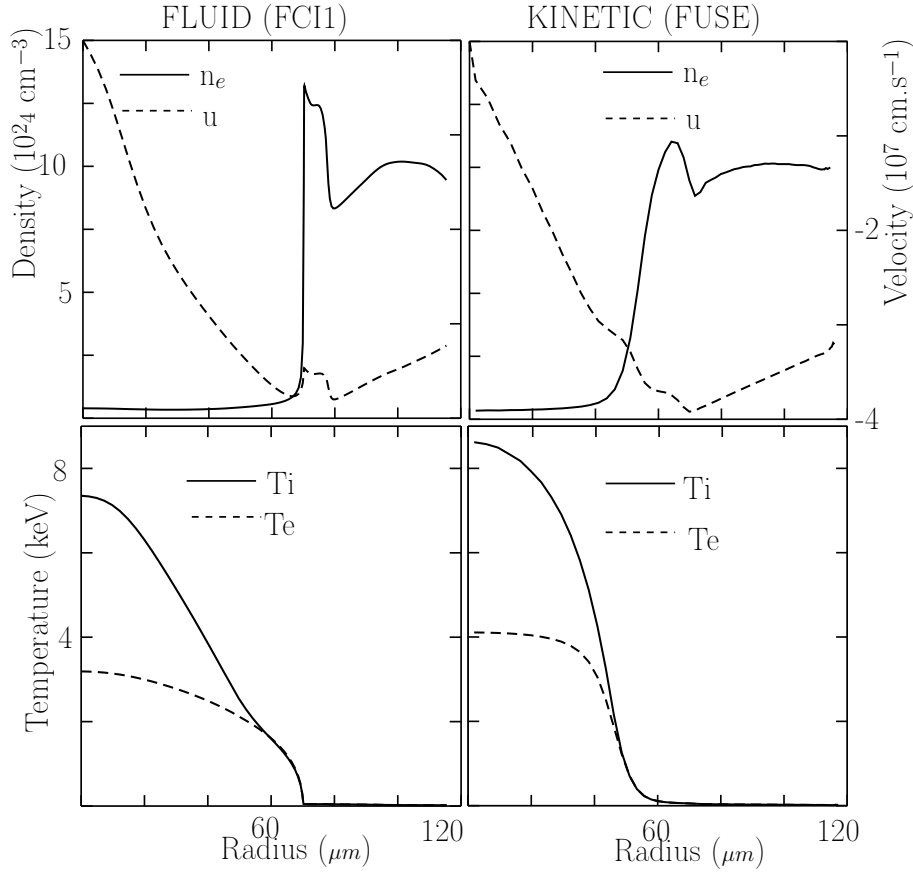


FIGURE 7.7 – Comparaison des résultats des simulations fluide et cinétique au voisinage de la stagnation.

Profils de densité et de vitesse moyenne (en haut) et de températures électroniques-ioniques (en bas) tracés dans l'ensemble du combustible DT d'une cible d'ignition considérée au temps $t = 18120$ ps. Cet instant correspond à 780 ps après le début du calcul cinétique et est proche du temps d'ignition. A gauche : simulation fluide (FCI1) ; à droite : calcul cinétique (FUSE).

Ce désynchronisme observé sur les courbes de température est lié à la manière dont les structures de choc sont modélisées dans les deux approches fluide/cinétique. On sait en effet [18, 62, 74] que les effets cinétiques perturbent les fronts de choc, qui se propagent dans la capsule. En particulier, une modélisation cinétique induit un choc *large*. Réciproquement, un code fluide où les zones de gradient raide sont fortement influencées par une pseudo-viscosité artificielle, peut avoir tendance à localiser les fronts de manière abusive. Par conséquent, les variations de température induites par l'arrivée du choc dans la zone centrale du point chaud tendent à se produire plus tôt dans la modélisation cinétique et dans une zone plus étendue que la largeur de choc fluide.

Pour illustrer l'importance des effets cinétiques pendant l'implosion, on étudie le profil spatial de la différence $T_{\parallel} - T_{\perp}$ entre les températures ioniques parallèle et transverse respectivement. Ces températures sont des moments particuliers de la fonction de distribution des ions. Pour une espèce ionique i , on a :

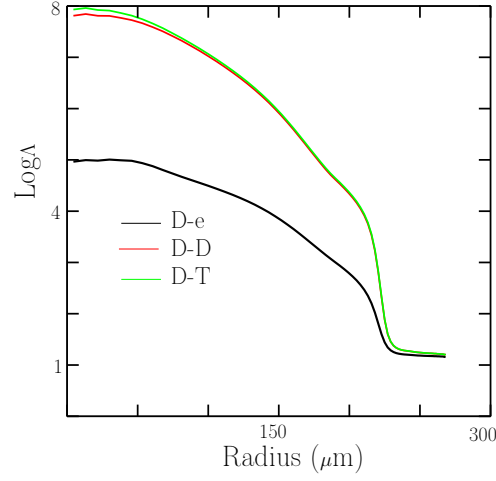
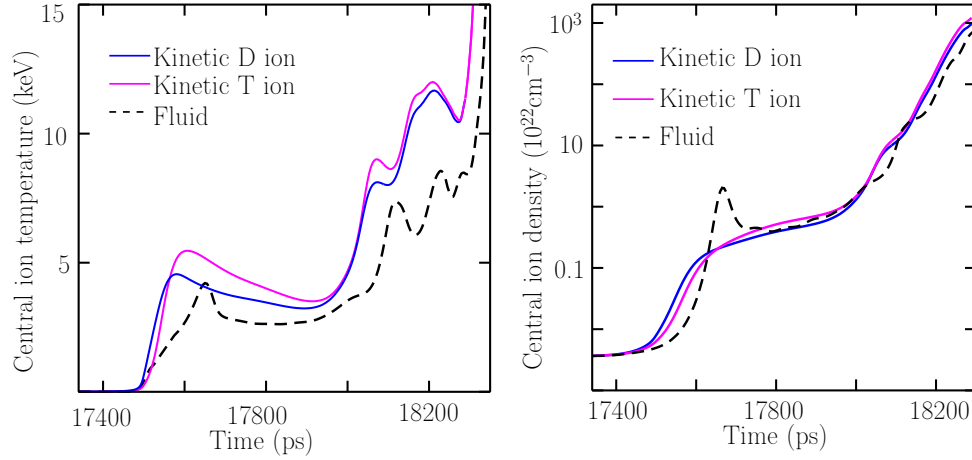

 FIGURE 7.8 – Profils spatiaux des logarithmes de Coulomb au temps $t = 17650$ ps.


FIGURE 7.9 – Comparaison des températures et densités ioniques centrales (pour chaque espèce) durant la phase d'implosion entre le calcul fluide et cinétique.

$$T_{\parallel}^i = \frac{m_i}{2n_i} \int (v_r - u_i)^2 f_i(v_r, v_{\perp}) d^3v,$$

et

$$T_{\perp}^i = \frac{m_i}{2n_i} \int v_{\perp}^2 f_i(v_r, v_{\perp}) d^3v.$$

La température ionique totale parallèle-transverse est ensuite calculée par une moyenne sur toutes les espèces d'ions :

$$T_{\parallel,\perp} = \frac{1}{\sum_i n_i} \sum_i n_i T_{\parallel,\perp}^i.$$

Les profils spatiaux correspondant sont représentées durant la fin d'implosion sur la Fig. 7.10-gauche. Les effets cinétiques sont bien visibles dans la zone centrale, où $T_{\parallel} > T_{\perp}$,

particulièrement aux instants correspondant à l'arrivée du choc principal. On met ainsi en évidence des effets de viscosité ionique, qui influencent les profils hydrodynamiques et la dynamique d'évolution du point chaud. Ces effets ne peuvent pas être précisément décrits dans une simulation fluide. Il s'en suit une modélisation différente de la propagation des chocs, particulièrement pendant la phase de rebond central. A des instants plus tardifs, les effets collisionnels s'intensifient à l'abord du domaine d'ignition¹⁷ et la différence T_{\parallel} et T_{\perp} s'estompe : les fonctions de distribution des espèces thermiques tendent alors vers des distributions Maxwelliennes.

Aussi, les effets cinétiques perturbent les flux de chaleur ionique pendant l'implosion. On peut calculer les flux de chaleur ionique à partir des fonctions de distribution des ions. Pour une espèce ionique i , on définit :

$$Q_i = Q_{\parallel}^i + Q_{\perp}^i$$

avec :

$$Q_{\parallel}^i = \frac{m_i}{2} \int (v_r - u_i)^3 f_i(v_r, v_{\perp}) d^3v,$$

et

$$Q_{\perp}^i = \frac{m_i}{2} \int (v_r - u_i) v_{\perp}^2 f_i(v_r, v_{\perp}) d^3v.$$

Le flux de chaleur ionique totale d'obtient en moyennant sur les différentes espèces d'ion :

$$Q = \sum_i Q_i.$$

Les effets cinétiques se manifestent sur le flux de chaleur ionique, particulièrement au niveau de la zone centrale, et au voisinage de l'interface point chaud/coquille dense (voir Fig.7.10-gauche pour une comparaison fluide/cinétique sur les flux de chaleur ionique au temps $t = 17800$ ps). Le flux de chaleur ionique cinétique apparaît en particulier moins intense au niveau de l'interface point chaud/combustible dense. Ceci influe sur la position de la zone dense, qui se rapproche plus vite du centre dans le calcul cinétique. Ceci interprète en particulier les profils de température de la Fig. 7.7.

De plus, dans le calcul cinétique multi-espèce considéré, l'espèce ionique T tend à être légèrement plus chaude que l'espèce D, en particulier dans la zone centrale du point chaud (Fig.7.9-gauche). La différence $T_T - T_D$ entre les températures ioniques associées aux espèces D et T respectivement, atteint une valeur maximale de l'ordre de ~ 500 eV lorsque le choc arrive dans la région du centre (ce qui se produit aux alentours de $t \approx 17500$ ps après le début d'implosion). Ensuite, cette différence tend à s'estomper lorsque la cible se rapproche du domaine d'ignition. Cet écart de température a d'ailleurs été mis en évidence expérimentalement [74], et pourrait ainsi s'expliquer par un effet de séparation d'espèces dans le point chaud [73]. Cette hypothèse est d'ailleurs étayée par l'étude de l'évolution temporelle des densités des espèces D et T, n_D et n_T respectivement, observées au centre du point chaud (voir Fig. 7.9-droite).

17. On désigne par "instant d'ignition" le moment où les réactions de fusion démarrent de manière significative, comme on peut l'observer par exemple sur les courbes de puissance ou sur la dynamique des températures-pressions centrales.

Cette séparation peut s'expliquer par des effets cinématiques liés au processus de conversion de l'énergie cinétique portée par les ions D,T en énergie thermique, s'opérant au cours du ralentissement de la capsule. Comme les deux espèces sont approximativement entraînées à la même vitesse, il apparaît naturel que l'espèce la plus lourde (celle possédant une énergie cinétique plus grande) soit caractérisée - après conversion de son énergie cinétique en énergie thermique - par une température plus importante. Aussi, aux instants correspondant à la phase de convergence du choc, le temps de collision ion-ion moyen est ~ 100 ps dans la région centrale du point chaud. Cette estimation est du même ordre de grandeur que la durée pendant laquelle le découplage des températures $T_T - T_D$ subsiste, celui-ci durant ~ 400 ps.

De manière plus précise, la différence de températures entre les espèces D et T au centre du point chaud est influencée par deux effets antagonistes :

- les effets cinématiques liées à la conversion d'énergie cinétique en énergie interne, alimentant la différence de températures entre les espèces D et T.
- les effets collisionnels qui tendent à équilibrer les deux températures T_T et T_D .

Cette compétition explique notamment pourquoi la différence de température $T_T - T_D$ subsiste pendant une durée plus longue (quoique du même ordre de grandeur) que le temps de collision ion-ion.

En outre, la séparation des espèces D et T qui tend à se former au centre du point chaud donne naissance à une force de friction supplémentaire, ce qui induit un terme de chauffage supplémentaire au centre du point chaud. Ceci peut expliquer pourquoi la température centrale tend à augmenter plus vite dans le calcul cinétique multi-espèces, comparé à un calcul moyen mono-espèce, tel que celui présenté dans la référence [51]. Dans les calculs de la référence [51], les ions D et T ne sont pas traités séparément¹⁸ mais sont remplacés par une espèce moyenne de nombre de masse 2.5.

Enfin, remarquons que les effets cinétiques se développant dans la zone centrale du choc sont tels que le flux de chaleur ionique central est plus important dans la simulation cinétique¹⁹. Cette augmentation du flux aurait tendance à lisser le pic de température centrale. Néanmoins, les effets cinétiques associés à l'élargissement du choc et les effets multi-espèces de friction collisionnelle liés à la séparation des espèces D et T tendent à contrebalancer les effets du flux de chaleur. Au final, le calcul cinétique multi-espèce révèle une température centrale plus élevée.

On peut enfin étudier plus en détail l'écart des fonctions de distributions f_i calculées par FUSE par rapport aux distributions Maxwelliennes locales \mathcal{M}_i (correspondant à la même valeur locale pour la densité, la vitesse et la température). Pour ce faire, on représente dans l'espace des vitesses thermiques la différence $(\mathcal{M}_i(n_i, U_i, T_i) - f_i)(r, v_r, v_\perp, t)/f_i^{max}$, en normalisant par rapport à la valeur maximale de la fonction de distribution. Le champ est ainsi représenté en fonction de la vitesse pour l'espèce ionique D au temps $t = 17800$ ps, en différents points de la capsule précisés sur la Fig. 7.11.

Un écart aux fonctions de distribution de Maxwell-Boltzmann est clairement visible dans la zone centrale, où le choc convergent déclenche les effets cinétiques, qui perturbent ensuite les flux de chaleurs ioniques, la viscosité ionique dans la zone de choc, et l'évolution

18. Cela induisait à l'époque des temps calculs prohibitifs

19. Cet effet avait d'ailleurs déjà mis en évidence dans la référence [52].

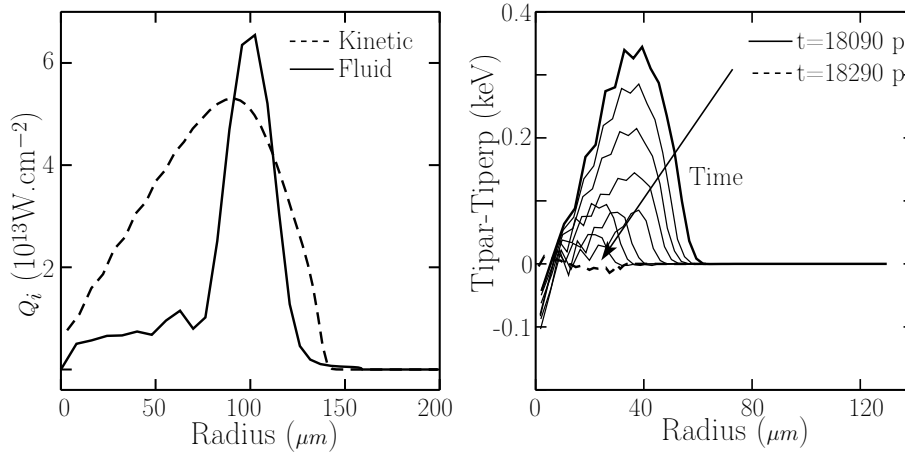


FIGURE 7.10 – Effets cinétiques pendant l'implosion.

A gauche : profil spatial du flux de chaleur ionique au temps $t = 17800 \text{ ps}$, correspondant à la convergence du choc ; à droite : profil spatial de la différence de températures $T_{\parallel} - T_{\perp}$ (associé aux effets de viscosité ionique) à différents temps pendant l'implosion.

de la température de la zone choquée. On peut également observer que les queues des fonctions de distribution calculées par le code cinétique sont moins peuplées pour les fortes vitesses (on parle de "tail depletion"). Cela pourrait avoir tendance à modifier la réactivité du système, celle-ci dépendant fortement de la queue des fonctions de distribution. Cet effet est particulièrement visible dans la zone située au voisinage de l'interface entre le point chaud et la coquille dense (voir le bas de la Fig. 7.11). Ce comportement non-Maxwellien est la conséquence des effets non-locaux dans le transport des ions. Ces effets sont naturellement pris en compte par l'approche cinétique.

Toutefois, l'effet de déplétion des queues de distribution sur la réactivité du système apparaît faible : le calcul de la réactivité à partir des fonctions de distribution est très proche de l'estimation déduite des fonctions Maxwelliennes équivalentes. Les effets cinétiques ne semblent pas perturber les taux de réaction de fusion pendant la naissance ou la propagation de la flamme. Les profils spatiaux de réactivité sont représentés pendant le début de la combustion sur la Fig. 7.12. Ce résultat va ainsi quelque peu à l'encontre des travaux récents de Molvig et al. [66]. Ceci s'explique par le fait que le nombre de Knudsen Kn , correspondant au rapport entre le libre parcours de collision des ions thermiques D, T avec le rayon du point chaud est en fait très petit dans le cas considéré ici. De façon plus quantitative, on a $\text{Kn} \sim 4 \times 10^{-3}$, puisqu' aux temps correspondant au début de la combustion, le libre parcours collisionnel des ions D, T vaut $\sim 0.1 \mu\text{m}$, tandis que le rayon du point chaud est $\sim 25 \mu\text{m}$. Il est ainsi naturel d'observer un effet faible sur les profils de réactivité (voir Fig. 7.12) même si les fonctions de distribution présentent clairement des caractéristiques non-Maxwelliennes.

Ainsi, les effets cinétiques durant l'implosion perturbent les fonctions de distribution des espèces thermiques, ayant une forte influence sur la viscosité ionique et le flux de chaleur ionique, plus particulièrement lorsque le choc principal convergent atteint le centre de la capsule et rebondit. Les profils hydrodynamiques sont alors directement impactés et

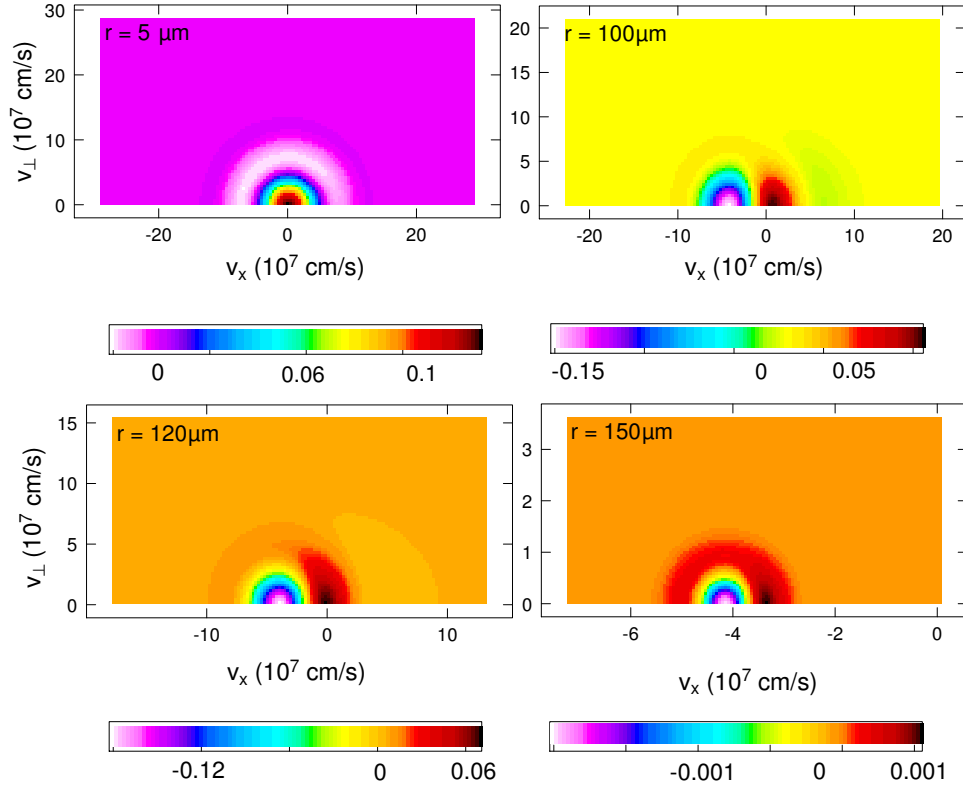


FIGURE 7.11 – Effets hors-équilibre durant l’implosion.

Les cartes de couleur représentent l’écart $(\mathcal{M}_i(n_i, U_i, T_i) - f_i)/f_i^{\max}$ des fonctions distributions ioniques (composante thermique calculée par le code cinétique FUSE) par rapport à la fonction de distribution de Maxwell-Boltzmann locale au temps $t = 17800$ ps.

diffèrent clairement de ceux issus de la simulation fluide. Cela modifie la manière dont le combustible atteint le domaine d’ignition : la combustion semble se développer de manière quelque peu prématurée dans le calcul cinétique, au sein d’un combustible légèrement plus gros et moins comprimé.

7.7 Effets cinétiques pendant la phase de combustion

Nous passons maintenant à l’étude cinétique de la phase de combustion, pendant laquelle les particules α suprathermiques produites par réactions de fusion interagissent avec les particules thermiques. Nous montrons en particulier que notre approche cinétique multi-échelle spécialement conçue pour modéliser de manière précise le couplage entre les particules rapides et les ions thermiques permet de mettre en évidence des effets importants sur la structure de la flamme de combustion.

7.7.1 Mise en évidence d’un précurseur cinétique

Nous commençons par tracer les profils spatiaux de température électronique et ionique dans les cas fluide/cinétique durant le début du processus de combustion, lorsque

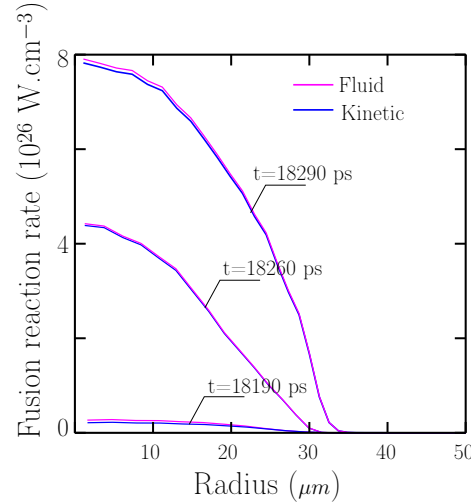


FIGURE 7.12 – Profils spatiaux de taux de réaction de fusion dans le combustible DT. Les courbes en bleu correspondent à un terme source de réactions de fusion, calculé à partir des fonctions de distribution non-Maxwelliennes, obtenues par résolution des équations de Vlasov-Fokker-Planck pour chaque espèce. Les courbes en magenta correspondent à un terme source calculé à partir des fonctions de distribution Maxwelliennes locales.

les particules α commencent à jouer un rôle important. En raison du désynchronisme entre les simulations cinétique et fluide, qui se déclenche dès la fin de l'implosion, les comparaisons ne peuvent être effectuées aux mêmes temps absolus. On définit alors les temps d'observation relativement à la physique du fonctionnement de la capsule : plus spécifiquement, le premier temps de comparaison correspond au temps où la masse surfacique du combustible $\int \rho_{DT} dt$ est maximale. Le temps final est défini par l'instant où la puissance dégagée P_{th} par les réactions de fusion atteint sa valeur maximale. Ce faisant, on peut comparer de manière pertinente le développement du processus de combustion, en particulier la naissance et la propagation de la flamme, simulé par le code fluide et le code cinétique, respectivement. La comparaison des profils de température durant le début de la combustion est illustrée sur la Fig. 7.13.

Le calcul cinétique met alors clairement en évidence une *onde de préchauffage* (que l'on appellera aussi dans la suite *précurseur*) bien définie se propageant dans le combustible dense devant le front de température. La température centrale des ions (~ 30 keV) est aussi beaucoup plus faible que dans la simulation fluide (~ 45 keV).

Pour analyser plus en détail les mécanismes aboutissant à la formation du précurseur, qui n'apparaît pas dans la simulation fluide, on s'appuie sur notre approche à deux échelles d'énergie pour étudier séparément la répartition spatiale des particules α suprathermiques et thermiques, respectivement. On représente ainsi sur la Fig. 7.14 les profils spatiaux de densité n_{α}^{ST} (échelle suprathermique) et n_{α}^T (échelle thermique), et ce, pendant toute la phase de début de combustion. La densité de particules suprathermiques est clairement plus importante dans le point chaud central, là où la température et par conséquent le taux de réaction de fusion sont plus élevés. Les produits de fusion suprathermiques créés dans le centre déposent ensuite leur énergie au niveau de la surface interne de la coquille

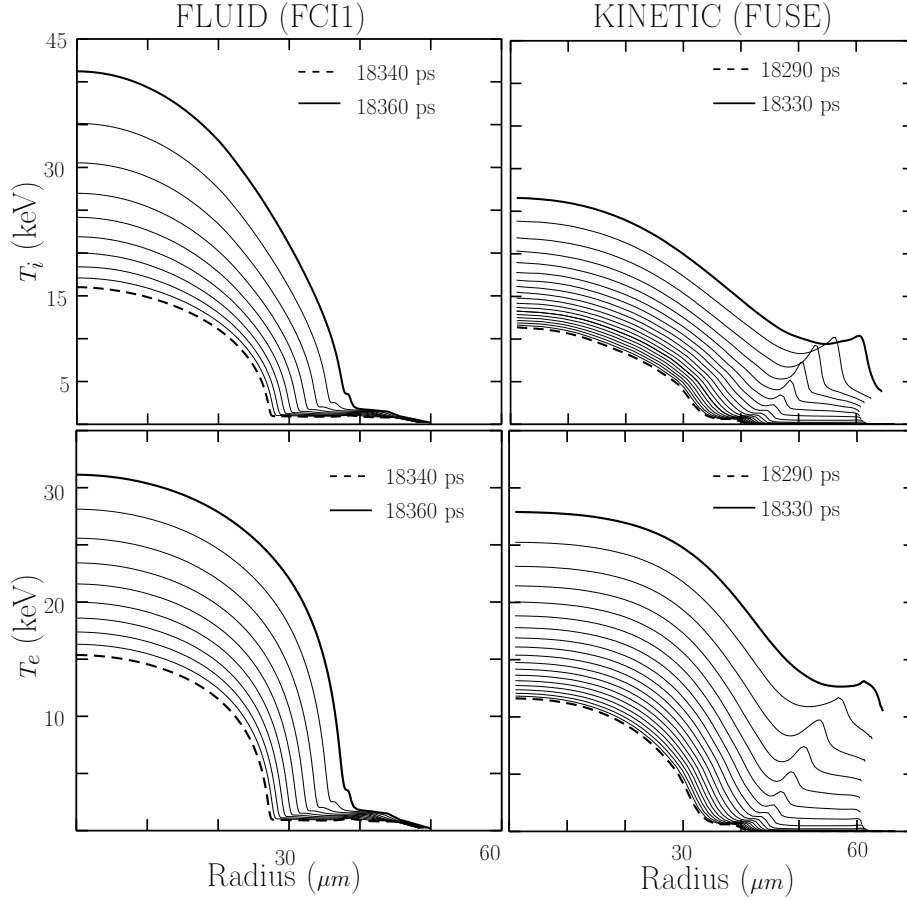


FIGURE 7.13 – Comparaison des résultats des simulations fluide et cinétique durant le début de la phase de combustion.

Les instants choisis correspondent à la propagation de la flamme au sein de la coquille de combustible dense. À gauche : calcul fluide (FC11) ; à droite : simulation cinétique (FUSE).

dense de combustible. La région du dépôt est marquée par la décroissance des profils de densité suprathermiques, bien visibles sur la Fig. 7.14-gauche. De manière correspondante, le sursaut de densité thermique indique l'accumulation de particules α thermalisées.

Les figures 7.13 et 7.14 illustrent clairement le caractère *non-local* du transport des particules α suprathermiques. Les particules rapides déposent leur énergie en surface interne de la coquille de combustible dense. La distance de dépôt est en particulier plus grande que celle observée dans une simulation fluide employant un modèle de diffusion pour traiter les produits de fusion. Insistons bien sur le fait que l'effet non-local du transport ne peut se résumer simplement par un nombre sans dimension, correspondant par exemple au rapport d'un libre parcours moyen collisionnel par le rayon du point chaud. Un calcul cinétique complet appliqué à l'échelle suprathermique et couplé de manière cohérente à l'échelle thermique est nécessaire pour modéliser finement les mécanismes du transport et de dépôt d'énergie associés aux produits de fusion. Ces effets fins dans le transport de produits de fusion et dans le couplage entre les deux échelles d'énergie influent sur le

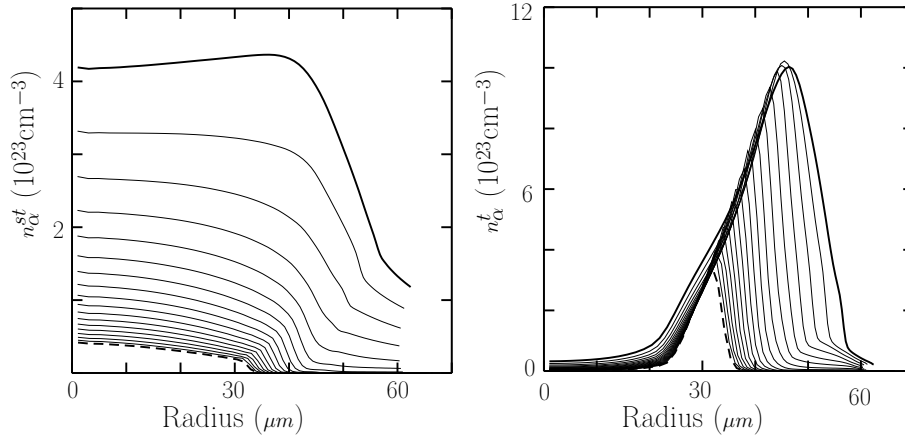


FIGURE 7.14 – Profils spatiaux de densité associés aux deux composantes de la fonction de distribution des particules α considérés pendant le début de la phase de combustion.

On observe clairement que les particules α thermiques s'accumulent dans la région correspondant au précurseur mise en évidence sur les courbes de températures de la Fig. 7.13-right. A gauche : composante α suprathermique ; à droite : composante α thermique. Pointillés : $t = 18290$ ps ; traits pleins : $t = 18330$ ps. L'origine des temps correspond au début du processus d'implosion.

processus de combustion observé au niveau global.

Aussi, en comparant les profils de température ionique (Fig.7.13-en haut à droite) avec les profils de densité de particules α thermiques (Fig.7.14-droite), durant toute la première phase de combustion, on observe une corrélation nette entre l'onde de préchauffage qui se forme à l'avant du front de température principal et l'accumulation de particules α thermiques. Ces particules proviennent du ralentissement des particules suprathermiques, produites dans le cœur du point chaud. Les particules énergétiques sont d'abord freinées par collisions électroniques, puis par le jeu des collisions sur les ions thermiques D,T. Les collisions α -ions dominent la fin du processus du ralentissement. Cette phase collisionnelle se déroule principalement dans la zone spatiale du combustible située proche de la surface interne du combustible dense. C'est dans cette région que s'accumulent les particules α thermalisées (voir le sursaut de densité dans le profil spatial représenté sur la Fig.7.14-droite). L'importance des collisions $\alpha-i$ est liée au pic de Bragg [40], dont l'effet est tel que les particules α déposent essentiellement leur énergie sur les ions thermiques lorsqu'elles approchent du domaine de vitesse thermique. Le pic de Bragg provient en fait de la dépendance en $\sim 1/v^2$ du terme de friction collisionnelle α -ion (voir Eq.(4.8)).

L'onde de préchauffage qui se développe dans le calcul cinétique apparaît donc liée à l'effet *non-local* dans le transport des particules suprathermiques. Réciproquement, le calcul fluide, basé sur une approximation de type diffusion pour simuler le transport des produits de fusion, peut avoir tendance à piéger artificiellement les particules α à l'intérieur du point chaud, augmentant alors la température et la réactivité du système. Pour confirmer cette analyse, on cherche à isoler l'effet du transport des particules rapides. Pour ce faire, on *localise* artificiellement le dépôt des α en augmentant la fréquence de collision entre les particules α et les électrons. Le libre parcours des α est alors réduit,

mais les ions (thermiques et suprathérmiqes) restent modélisés au niveau cinétique. Les profils de température correspondants sont représentés pendant le début de la combustion sur la Fig. 7.15. De manière naturelle, les fronts de température sont plus localisés, et la température du point chaud atteint des valeurs significativement supérieures. On retrouve ainsi le comportement de la simulation fluide où un modèle de diffusion est employé (voir Fig. 7.13-en haut à gauche). En outre, l'énergie de fusion produite dans le calcul cinétique où le dépôt des α est localisé est $\sim 17 \text{ MJ} \pm 20 \%$, ce qui est cohérent avec l'estimation fluide ($\sim 19 \text{ MJ}$). Ainsi, la diminution significative de l'énergie produite observée dans les calculs cinétiques apparaît comme une *conséquence directe du caractère non-local du transport* des produits de fusion. On retrouve ainsi le rôle clé joué par le chauffage lié aux produits de fusion sur la propagation de la flamme, déjà suggéré dans les références [34, 35]. L'aspect non-local du dépôt d'énergie avait d'ailleurs déjà été souligné dans la référence [31] par une approche analytique de la phase de ralentissement d'une capsule FCI avec prise en compte des réactions de fusion.

Enfin, comme la combustion s'amorce légèrement plus tôt dans le calcul cinétique, les profils de densité électroniques relevés pendant le début de la combustion sont plus faibles que dans le calcul fluide (voir Fig. 7.13-en haut à gauche). Aussi, comme les particules α déposent leur impulsion dans une zone plus éloignée du centre, la coquille dense de combustible - mise en vitesse par le dépôt d'énergie et d'impulsion des α - est caractérisée par une vitesse moyenne plus importante dans la simulation cinétique (voir Fig. 7.18- en bas).

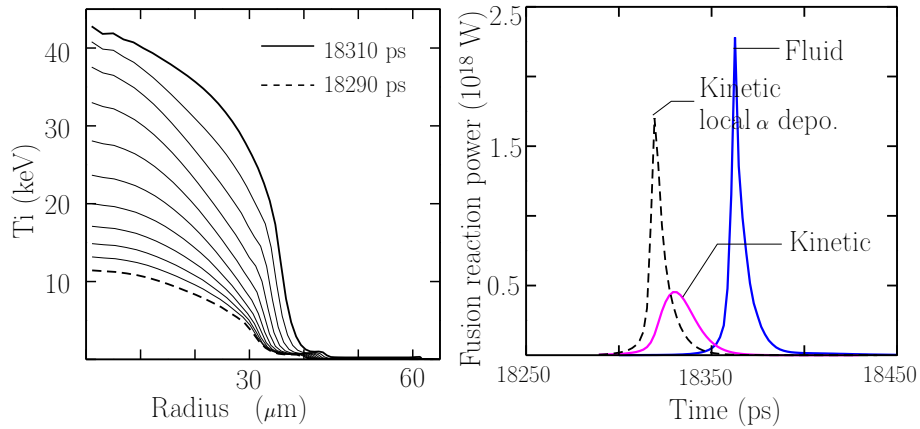


FIGURE 7.15 – Profils de température ionique et puissance de fusion dégagée dans une simulation cinétique où le transport des particules α est artificiellement localisé.

7.7.2 Structure de la flamme de combustion

Pour illustrer la cohérence d'ensemble de nos résultats de simulation cinétique, et analyser plus en détail le début du processus de combustion, on étudie le développement de la flamme de combustion, en considérant les profils spatiaux des taux de réaction de fusion, représentés pendant le début de la combustion sur la Fig. 7.18-haut. Dès le début, l'onde de combustion cinétique apparaît *moins localisée* que dans le calcul fluide, et s'étend

sur une zone *plus large*, atteignant des régions situées plus loin du centre. Les différences fluide/cinétique s'intensifient ensuite pendant le déroulement de la combustion, lorsque la flamme se développe et se propage dans le combustible (voir Fig.7.16-bas) : le front de combustion cinétique est beaucoup moins piqué et plus large sur la flamme fluide.

Remarque 7.7.1 *Le pic observé sur le profil spatial dans la région $r = 40 \mu\text{m}$ est lié à la forme du profil de densité électronique pendant la combustion (comme le montre par exemple le profil spatial de densité électronique au temps 18360 ps représenté sur la Fig.7.18-en haut à gauche).*

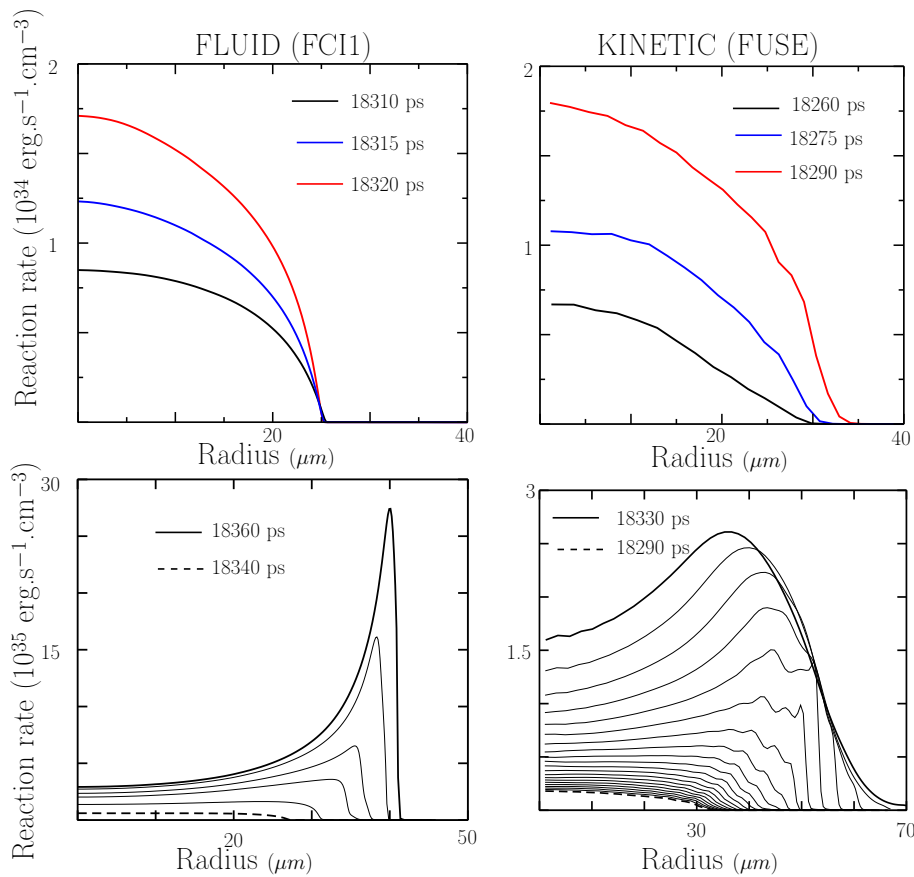


FIGURE 7.16 – Comparaison des structures de flamme pendant la naissance et la propagation du front de combustion.

Gauche : calcul fluide ; droite : calcul cinétique.

7.7.3 Perturbation cinétique des flux de chaleur ioniques

Le transport non-local des particules α modifie significativement les profils spatiaux du flux de chaleur ionique, en particulier pendant la propagation de la flamme (voir Fig. 7.17). On retrouve une structure de type précurseur en avant du front principal. Cette phénoménologie est ainsi cohérente avec l'existence de l'onde de pré-chauffage visible sur

les profils de température et portée par les particules rapides. L'effet du transport cinétique des particules α est aussi visible sur les flux de chaleur électroniques (voir Fig. 7.17-bas) : les flux de chaleur tendent à devenir négatif dans la région du précurseur.

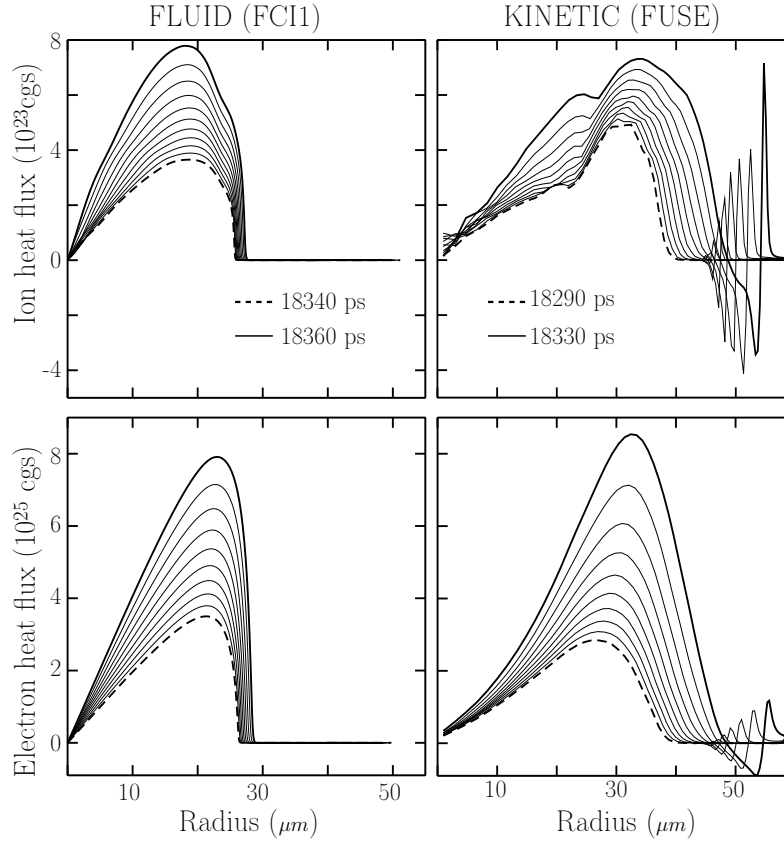


FIGURE 7.17 – Comparaison des flux de chaleur ionique et électronique durant la propagation de la flamme entre les calculs fluide et cinétique.

Gauche : calcul fluide ; droite : calcul cinétique ; haut : flux de chaleur ionique ; bas : flux de chaleur électronique.

7.8 Le processus de combustion au niveau cinétique

Dans cette section, on s'intéresse au couplage entre les deux échelles caractéristiques de la fonction de distribution des particules α , et ce, pendant la phase de combustion. Cela illustre la pertinence de l'approche multi-échelle du problème. Pour ce faire, on étudie *localement* le processus de combustion, en suivant une maille test donnée, que l'on désigne par i_0 , choisie à l'intérieur du point chaud. L'évolution temporelle de la cellule test $r_{i_0}(t)$ et les conditions thermodynamiques qui y règnent sont représentées sur la Fig. 7.19. On représente alors dans l'espace des vitesses l'évolution de la composante suprathermique de la fonction de distribution des particules α , $f_{\alpha}^{ST}(r_{i_0}(t), v, \theta, t)$, considérée dans la maille test à différents instants. L'échelle suprathermique est ainsi illustrée sur la Fig. 7.20, à différents temps précédant la combustion locale de la cellule test.

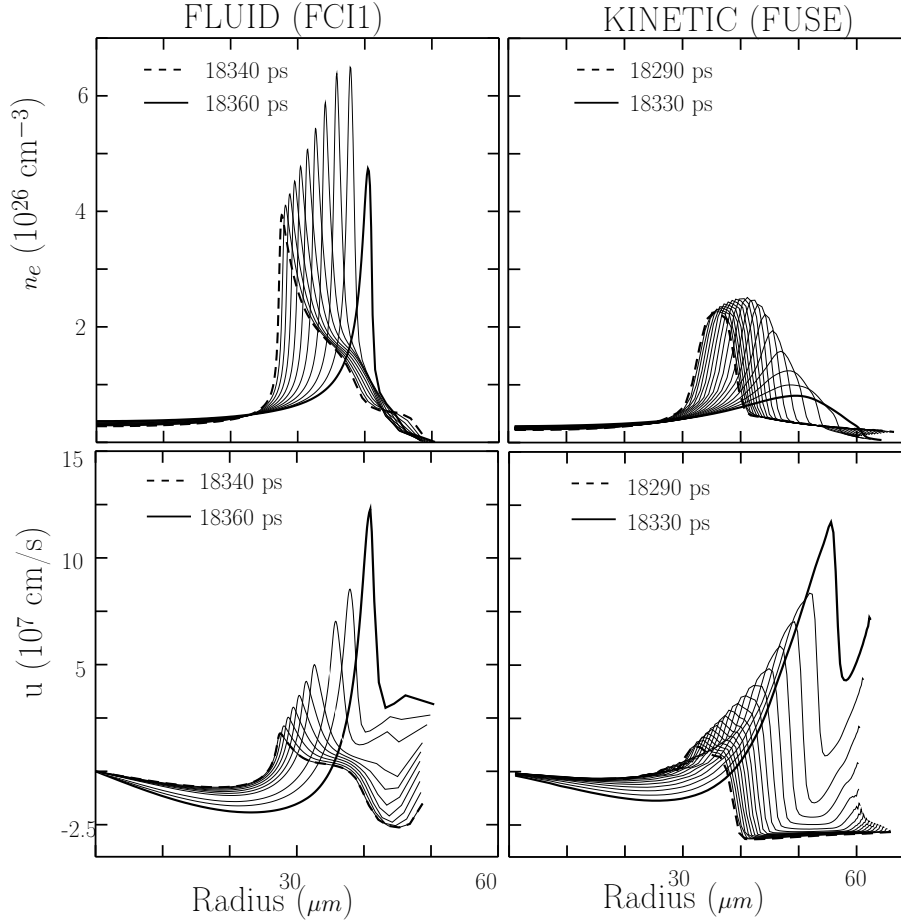


FIGURE 7.18 – Comparaison des profils de densité et vitesse moyenne pendant la phase de propagation de la flamme au sein du combustible dense.

La composante suprathermique apparaît fortement *anisotrope*, principalement piquée vers les vitesses positives $v_r > 0$. Cette anisotropie est liée à l'inhomogénéité du terme de production des particules rapides créées par réactions de fusion, plus intense dans la région centrale du combustible. Comme la cellule test considérée i_0 est située dans une zone décentrée, située hors de la zone la plus émissive, un observateur lié à la cellule test voit passer les particules rapides de gauche à droite. Ces particules se ralentissent dans une zone située plus à l'extérieur. Autrement dit, le rayon de la cellule test dans laquelle on observe la fonction de distribution suprathermique est - aux premiers instants de la séquence Fig. 7.20- *inférieure* à la longueur de ralentissement des particules rapides (qui se déposent plus loin).

Ensuite, durant le processus d'implosion, le rayon de la cellule test diminue et il existe un instant où son rayon devient proche du libre parcours moyen des particules α (voir Fig.7.19-droite). A cet instant, les particules α déposent leur énergie *dans* la maille test : la composante suprathermique se ralentit, et s'approche du domaine des vitesses thermiques. Lors du ralentissement, la composante suprathermique a également tendance à *s'isotroper* dans l'espace des vitesses, en s'étalant sur un plus large domaine dans la

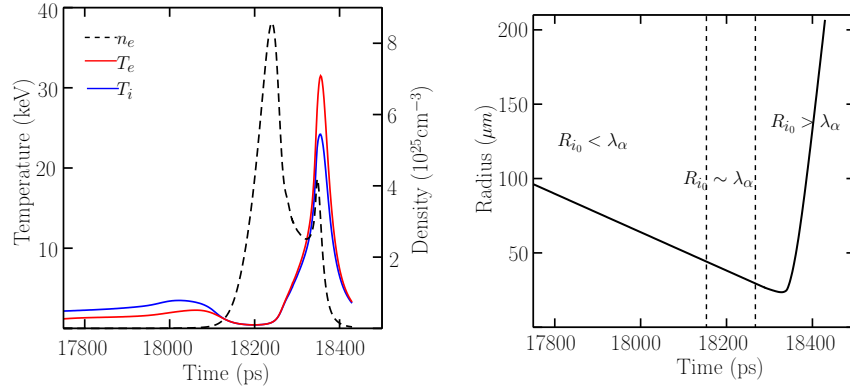


FIGURE 7.19 – Conditions thermodynamiques et rayon de la cellule spatiale test choisie pour l'étude locale du processus de combustion.

Gauche : conditions thermodynamiques observées dans la cellule test au cours de la combustion ; droite : évolution temporelle du rayon.

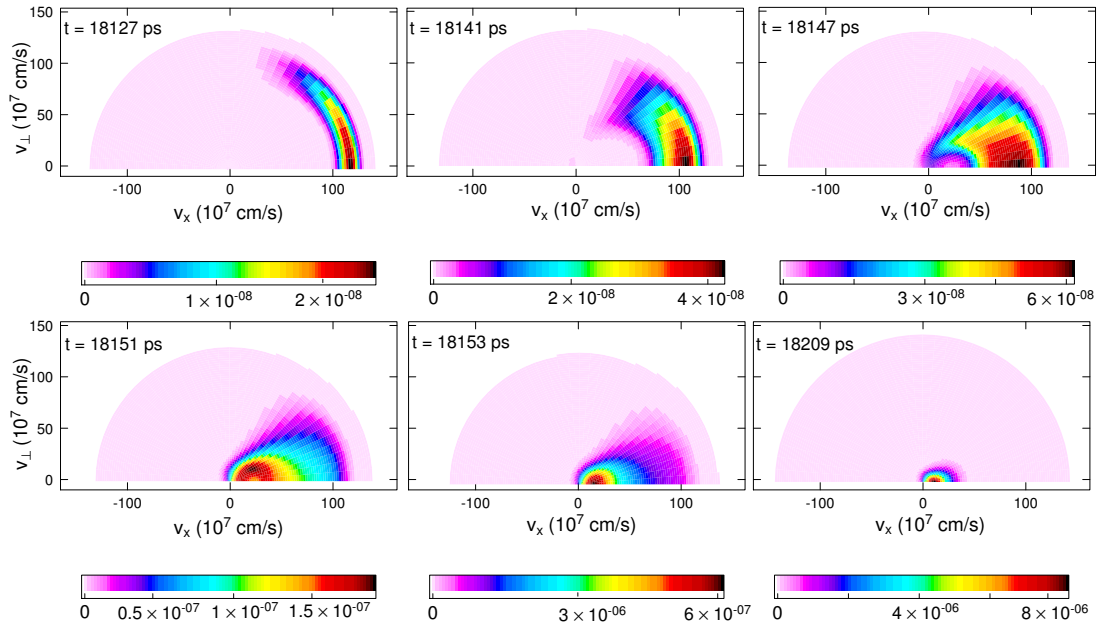


FIGURE 7.20 – Ralentissement des particules α suprathermiques observé dans la cellule spatiale test considérée.

direction de l'angle polaire. Cet effet de diffusion angulaire est la conséquence directe de la partie diffusive de l'opérateur de Fokker-Planck, générant un courant de ralentissement essentiellement transverse qui s'intensifie lorsque les particules α s'approchent de la zone des vitesses thermiques.

Lorsque les particules α modérément suprathermiques atteignent le domaine thermique, elles alimentent une composante thermique qui évolue à l'échelle de vitesse thermique et est représentée sur la Fig. 7.21. Cette composante thermique (mais non thermalisée) poursuit sa thermalisation en interagissant avec les autres fonctions de distribution thermiques (ions D,T et α thermiques) et les électrons.

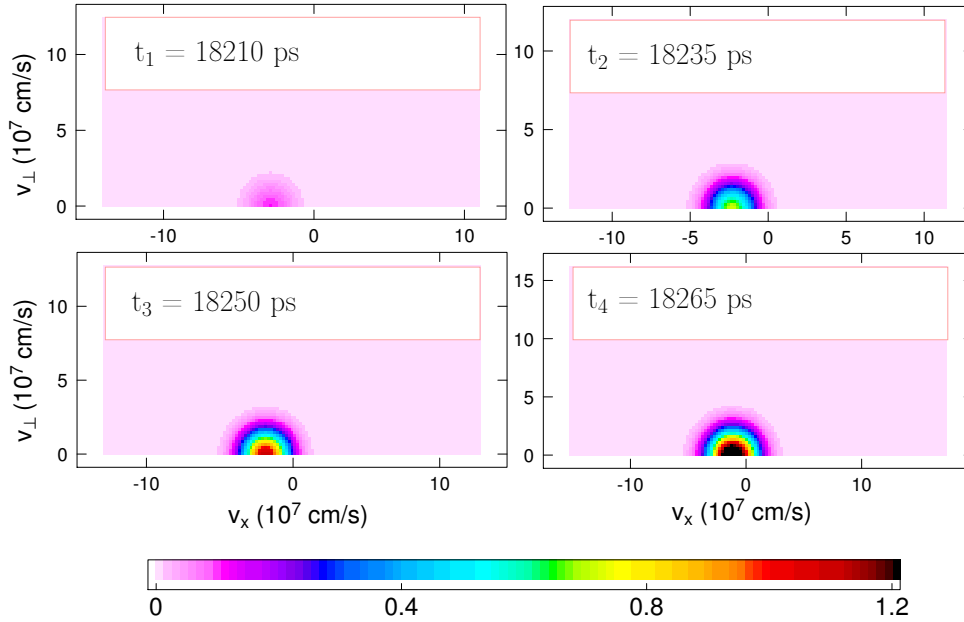


FIGURE 7.21 – Alimentation de la composante thermique par la composante suprathermique associée aux particules α .

La composante thermique est représentée sur la grille en vitesse thermique.

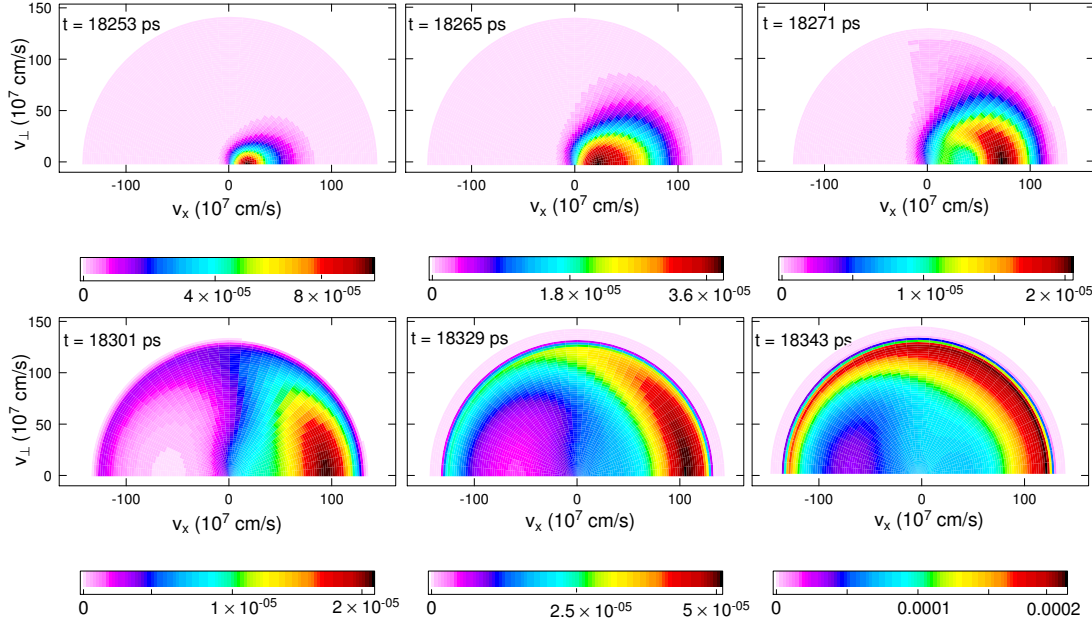


FIGURE 7.22 – Evolution temporelle de la composante suprathermique des particules α pendant le processus de combustion.

Finalement, durant le début de la combustion, la production de particules α rapides s'intensifie, la température locale de la maille test augmente et la densité diminue (voir Fig.7.19-gauche). La cellule-test redevient *transparente* aux particules rapides qui la traversent une nouvelle fois, formant alors localement une fonction de distribution à nouveau

anisotrope, caractérisée par des valeurs nettement plus élevées, correspondant au régime de combustion (voir Fig.7.22). On retrouve ici un effet de transparence du point chaud vis à vis des particules α , discuté de manière plus approfondie dans les références [2, 3].

7.9 Synthèse et perspectives

L'approche multi-échelle mise au point permet ainsi de traiter finement des configurations réalistes de cibles FCI en des temps de calcul raisonnables. On peut ainsi décrire la fin d'implosion, l'ignition et la propagation de la flamme de combustion au sein du combustible dense au niveau cinétique. La méthode numérique assure en outre une modélisation précise du transport, du ralentissement et de la thermalisation des particules rapides produites par les réactions de fusion. La résolution est ainsi effectuée de manière plus rigoureuse que dans les codes fluides usuels utilisant un schéma de type diffusion pour la modélisation des particules α . L'approche par diffusion n'est d'ailleurs a priori pas licite pour traiter les particules suprathermiques dont le libre parcours moyen est de l'ordre de la taille du point chaud.

Nous avons ainsi pu comparer précisément les résultats donnés par le code cinétique FUSE avec ceux du code fluide FC11, et ce, dès la fin du processus d'implosion et pendant toute la propagation de l'onde de combustion dans le combustible DT.

Les effets cinétiques se manifestent dès la convergence du choc au centre de la cible : les profils hydrodynamiques (densité, température) sont plus étalés dans la modélisation cinétique et les fonctions de distribution ioniques (composantes thermiques) tendent à dévier de la fonction de distribution de Maxwell-Boltzmann. Les effets cinétiques sont tels que le point chaud central monte en température plus rapidement dans le calcul cinétique. Une séparation des espèces ioniques D et T tend également à se développer au début de la phase de convergence du choc, puis disparaît lorsque le point chaud se densifie et devient plus collisionnel.

Par conséquent, la combustion se déclenche légèrement plus tôt dans la simulation cinétique, dans un combustible caractérisé par un volume plus important et une densité surfacique plus faible. Durant le processus de combustion, les effets cinétiques associés aux particules α suprathermiques se manifestent et modifient significativement la structure de la flamme. En particulier, l'aspect *non-local* du transport des particules rapides est mis en évidence par la modélisation cinétique. Les particules α suprathermiques déposent leur énergie et leur quantité de mouvement principalement *hors du point chaud*. La région correspondant à la zone du dépôt se situe au niveau de la surface interne de la coquille de combustible dense. Réciproquement, le calcul fluide basé sur un modèle approché de type diffusion pourrait avoir tendance à localiser de manière artificielle le dépôt d'énergie portée par les particules α à l'intérieur du point chaud central, et induire une température centrale plus élevée.

Les perturbations de la structure de flamme imputables aux effets de transport modifient les profils hydrodynamiques pendant la propagation du front de combustion au sein de la coquille de combustible dense. Le calcul cinétique révèle l'existence d'une onde de *préchauffage* (ou précurseur) se propageant à l'avant du front de combustion principal,

clairement identifiable au niveau des profils spatiaux de température ionique. Nous avons montré que le précurseur est étroitement lié à l'effet du pic de Bragg associé au dépôt d'énergie des particules α sur les ions thermiques.

A un niveau plus global, les effets cinétiques ioniques ont tendance à diminuer la température centrale, la pression du point chaud central, et l'énergie de fusion dégagée (réduction de l'ordre de $\sim 30\%$ à $\sim 50\%$).

Ce nouvel effet physique mis en évidence par l'approche multi-échelle du problème du ralentissement des particules rapides peut constituer une piste d'explication afin de rendre compte des difficultés rencontrées aujourd'hui dans l'atteinte de l'ignition des configurations actuelles de cibles de FCI. Toutefois, ceci ne peut expliquer pourquoi les capsules de DT ne s'allument pas : en effet, nos simulations cinétiques conduisent bien à un allumage, bien que la combustion qui en résulte soit significativement moins performante que dans une simulation fluide. D'autres facteurs (instabilités, mélange DT/pousseur, asymétries, interaction entre la capsule et la cavité...) peuvent être invoqués, éventuellement couplés à l'effet non-local du transport des produits de fusion, pour rendre compte du non-allumage des cibles.

Remarquons toutefois que l'effet présenté ici peut avoir des conséquences importantes sur les futurs designs de cibles, qui devraient tenir compte du dépôt non-local de l'énergie et de la quantité de mouvement portées par les particules rapides. Il serait d'ailleurs intéressant d'analyser les effets cinétiques ioniques dans des configurations de cibles différentes, par exemple caractérisées par un allumage marginal. Le travail effectué constitue la première étape, montrant que la méthode multi-échelle que l'on propose permet de traiter des configurations complètes sans engendrer de temps CPU prohibitifs. On met en évidence des effets cinétiques importants sur la structure du choc et sur la forme du front de combustion. Il est ainsi possible de suivre la même approche pour étudier finement les sensibilités de la réduction du gain des cibles et du seuil d'allumage par rapport au choix du design de cibles.

Notons aussi que si la surface entre le point chaud et la coquille est augmentée du fait de perturbations 2D ou 3D, l'aspect non-local du dépôt des produits de fusion induit un chauffage accru de la coquille de combustible dense. Dans le même temps, cela réduit le chauffage du point chaud central. L'effet global sur la balance énergétique du combustible complet n'est a priori pas évident et nécessite un calcul cinétique complet.

En outre, le caractère non-local du dépôt d'énergie des produits de fusion peut avoir une influence sur le développement du mélange éventuel entre le combustible DT et l'ablateur en CH. En effet, l'onde de préchauffage portée par les particules α peut interagir avec les structures de mélange DT/CH (telles que des aiguilles de CH pénétrant dans la coquille de combustible DT dense dans le cas d'une instabilité de type Rayleigh-Taylor [29, 7, 8] ou des structures de mélange induites par une instabilité de type Richtmyer-Meshkov ablative [33]) et perturber le taux de croissance de l'instabilité. Afin d'analyser ce processus plus en détail, la modélisation du pousseur en CH devrait être prise en compte de manière cohérente avec la modélisation cinétique du combustible. Ceci nécessite une extension de la méthode cinétique multi-échelle mise au point, rendant possible le couplage de certaines espèces ioniques traitées suivant une approche fluide (par exemple l'espèce C très collisionnelle) avec des espèces ioniques modélisées en cinétique (comme le D, T et le

H). Nous discutons plus en détail d'une telle extension dans l'annexe C.

Conclusion générale

Mise en évidence d'une unité des approches multi-échelles

La technique du développement asymptotique

Dans l'analyse des différents problèmes multi-échelles rencontrés au cours de cette thèse, une démarche générale d'approche se dessine. Elle consiste d'abord à définir un petit paramètre ε correspondant au rapport des échelles caractéristiques du problème :

- Dans le cas de la diffusion en milieu fissuré, traité dans la première partie, il s'agit du rapport entre l'échelle spatiale microscopique correspondant aux fissures et l'échelle macroscopique du domaine considéré.
- Dans la modélisation cinétique du phénomène de combustion des cibles de Fusion par Confinement Inertiel, abordée dans la seconde partie du manuscrit, ε correspond au rapport de deux échelles d'énergie. La petite échelle est liée aux particules thermales (ions D T), et la grande échelle correspond aux particules rapides (particules α) produites par réactions de fusion.

Bien que la petite valeur du rapport ε soit fixée par le problème physique, on interprète ε comme un petit paramètre que l'on fait tendre vers 0.

La méthode d'analyse consiste ensuite à effectuer une *mise à l'échelle* de la variable y suivant laquelle l'échelle microscopique se manifeste, en définissant une variable renormalisée $\tilde{y} = y/\varepsilon$, évoluant sur un support dilaté de taille macroscopique. Ceci permet alors d'envisager un développement asymptotique en puissance de ε du modèle mathématique sous-jacent.

Les termes dominants du développement asymptotique obtenu nous permettent ensuite de construire une technique de résolution numérique adaptée à la structure du problème :

- Dans le problème de diffusion en milieu fissuré, l'effet de l'échelle microscopique associée aux fissures se manifeste suivant la direction spatiale perpendiculaire à l'axe des fissures. La mise à l'échelle de la solution exacte $u_\varepsilon(x, y, t)$ s'effectue en définissant la fonction v_ε telle que $u_\varepsilon(x, y, t) = v_\varepsilon(x, \frac{y}{\varepsilon}, t)$. On écrit ensuite le problème à résoudre sur l'inconnue renormalisée v_ε . En injectant une solution de la forme : $v_\varepsilon(x, y, t) = v_0(x, y, t) + \varepsilon^2 v_1(x, y, t) + \varepsilon^4 v_2(x, y, t) + \dots$ dans le problème aux limites posé sur v_ε , on aboutit à une hiérarchie d'équations correspondant aux différents ordres du développement asymptotique. L'ordre dominant fait alors apparaître naturellement la forme du modèle moyen homogénéisé où l'échelle microscopique n'apparaît plus directement.

- Une démarche similaire est employée pour la modélisation cinétique de la phase de combustion des cibles FCI. Un couplage multi-échelle est à envisager entre les particules α produites par réactions de fusion et le reste du plasma (électrons et ions thermiques). Là encore, il est possible d'effectuer un développement asymptotique du modèle de Fokker-Planck sous-jacent décrivant les collisions entre les particules suprathermiques et les ions thermiques. Ce mécanisme collisionnel domine la fin du processus du ralentissement des produits de fusion qui tendent à se thermaliser. Le petit paramètre ε correspond pour ce problème au rapport de l'énergie typique des ions thermiques ($\sim \text{keV}$) sur l'énergie caractéristique des particules rapides ($\sim \text{MeV}$). Du point de vue des particules rapides, la fonction de distribution des ions cibles thermiques apparaissent très localisées dans l'espace des vitesses. Les coefficients de diffusion pilotant le ralentissement des particules rapides peuvent alors s'approcher par des expressions analytiques simples. Une analyse asymptotique du modèle montre qu'à l'échelle suprathermique, le ralentissement prend en fait la forme d'une advection conservative dans l'espace des vitesses tant que la vitesse des particules suprathermiques reste à l'extérieur du support en vitesse localisé des particules cibles thermiques. Lorsque les produits de fusion initialement suprathermiques atteignent le support des cibles, elles alimentent une composante à l'échelle thermique interagissant avec les fonctions de distributions des espèces cibles. La fonction de distribution des particules α devient ainsi bimodale. On propose alors une technique multi-échelle spécifiquement adaptée pour représenter les deux échelles caractéristiques de la fonction de distribution décrivant la population de particules α . Il apparaît pertinent de *scinder* l'opérateur de Fokker-Planck appliqué aux particules rapides en un système d'équations modélisant le couplage multi-échelle. Sur la base de cette décomposition en deux composantes, on construit différents algorithmes permettant de résoudre efficacement le modèle cinétique complet. On peut alors simuler finement la combustion de configurations réalistes de cibles FCI, sans engendrer des temps calculs prohibitifs.

Deux grandes familles de méthodes multi-échelles

Les problèmes multi-échelles ainsi traités illustrent dans des contextes physiques différents les deux grandes familles de méthode que l'on retrouve de manière générale dans l'analyse des systèmes multi-échelles :

- Soit on cherche à faire disparaître la petite échelle par homogénéisation, de façon à obtenir un problème moyen à l'échelle macroscopique seulement,
- Soit on traite conjointement les deux échelles du problème, en établissant une équation modèle à l'échelle macroscopique couplée à une équation traitant l'échelle microscopique.

Le modèle homogénéisé appliqué à la propagation de la chaleur dans un milieu fissuré périodique rentre dans la première catégorie. En faisant tendre l'échelle microscopique vers 0, on arrive à une équation moyenne écrite dans un domaine moyen où les fissures ne sont plus décrites directement. L'équation limite prend alors la forme d'une équation de la chaleur semblable au problème exact initial mais avec un terme source supplémentaire lié

aux caractéristiques des fissures. Ce terme source écrit à l'échelle macroscopique traduit le couplage multi-échelle.

En outre, la technique multi-échelle exposée dans la seconde partie du manuscrit sur la problématique cinétique illustre plutôt la deuxième catégorie de méthodes multi-échelles. Pour ce problème, on traite conjointement, et de façon couplée les deux échelles d'énergie. L'échelle macroscopique correspond à l'échelle d'énergie des particules suprathermiques, pour lesquelles la fonction de distribution évolue sur un large domaine de l'espace des vitesses, mais avec une variation assez lente. L'échelle microscopique est associée aux ions thermiques cibles, caractérisés par des fonctions de distribution variant rapidement sur un domaine très localisé autour de l'origine de l'espace des vitesses. On développe alors une technique multi-échelle particulière consistant à établir une équation d'évolution propre à chacune des deux échelles d'énergie. Les équations modèles correspondantes sont ensuite discrétisées sur deux maillages en vitesse distincts, dont la résolution est adaptée à l'échelle de variation à traiter. Une loi de couplage déduite de l'analyse de l'opérateur de Fokker-Planck appliqué aux particules rapides permet de lier les deux échelles de manière naturelle.

Structure générale unifiée des problèmes multi-échelles traités

Que l'on décide de supprimer la petite échelle en l'homogénéisant, ou de la traiter conjointement avec l'échelle macroscopique, le problème final obtenu possède en fait sensiblement la même structure générique, à savoir :

- une équation régissant l'échelle macroscopique, correspondant à un schéma de résolution *globale*,
- une expression de l'échelle microscopique au niveau du modèle macroscopique, traduisant le *couplage* multi-échelle,
- une équation gouvernant l'échelle microscopique, associée à un schéma de résolution *local*.

Nous rappelons sur le schéma récapitulatif Fig.23 les différents types de couplages multi-échelles étudiés dans ce travail de thèse.

Dans le cas du problème de la conductivité linéaire posé dans un milieu composite périodique (correspondant au schéma Fig.23-en haut à gauche), un problème local posé sur la cellule de périodicité permet de construire la matrice homogénéisée A^* . L'équation gouvernant l'échelle microscopique est dans ce cas le problème de cellule. L'échelle microscopique s'exprime dans la matrice de conductivité homogénéisée A^* qui évolue au niveau macroscopique. L'équation pilotant l'échelle macroscopique est alors l'équation de conductivité où la matrice de conductivité exacte $A\left(\frac{x}{\varepsilon}\right)$ est remplacée par la matrice homogénéisée A^* .

Pour le problème de la propagation de la chaleur en milieu fissuré (correspondant au schéma Fig.23-en haut à droite), le couplage multi-échelle prend une forme particulièrement simple. L'expression de l'échelle microscopique correspondant aux fissures n'apparaît que sous la forme d'un terme source dans l'équation de la chaleur pilotant l'échelle macroscopique. Le terme source est directement proportionnel à la largeur des fissures microscopiques, qui est une donnée du problème. Dans ce cas, il n'y a pas de problème

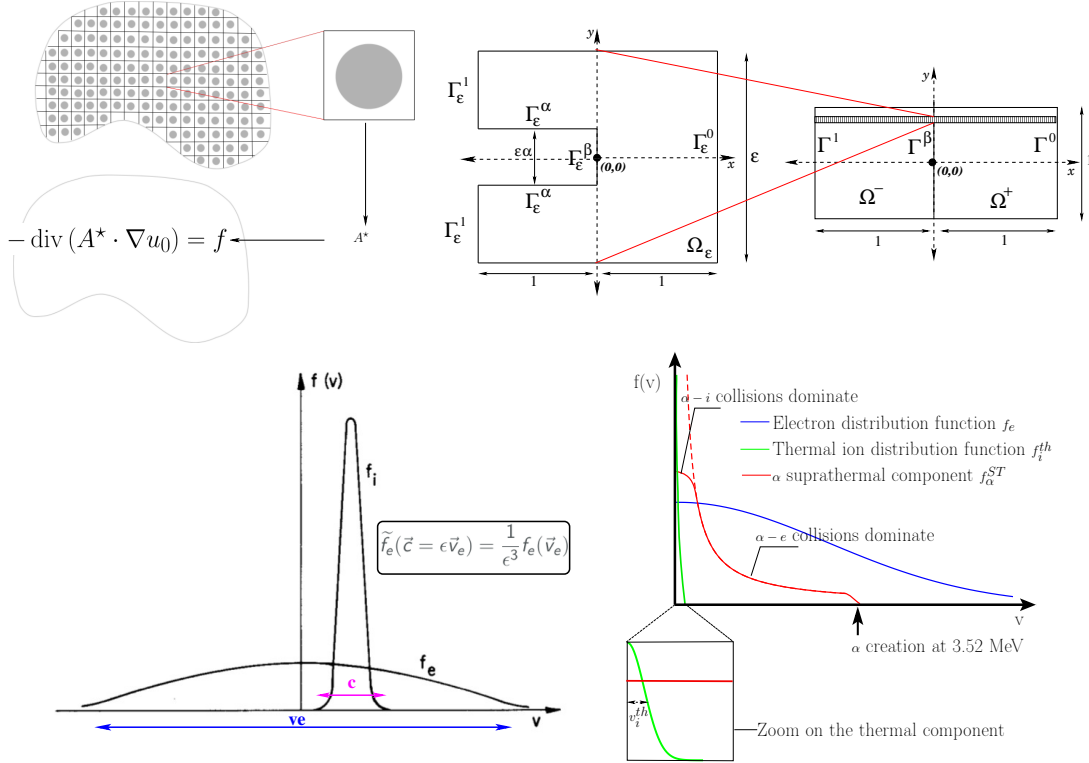


FIGURE 23 – Différentes formes de couplages multi-échelles.

de cellule à résoudre, l'équation gouvernant l'échelle microscopique étant en quelque sorte dégénérée.

En outre, lorsque la forme des fissures considérées change, la forme du modèle homogénéisé évolue également. Par exemple, si l'on considère des fissures en pointe, on montre que les fissures induisent non seulement un terme source, mais aussi une perturbation de la conductivité au niveau du modèle homogénéisé.

Les couplages multi-échelles étudiés dans le contexte des plasmas de fusion présentent une structure semblable.

Tout d'abord, considérons le couplage multi-échelle entre les ions thermiques et les électrons (représenté sur la Fig.23-en bas à gauche). La fonction de distribution des électrons est caractérisée par une largeur thermique v_{th}^e bien plus grande que la largeur des fonctions de distribution ioniques. En raison de leur faible masse, les électrons sont caractérisés par des temps de réponse très courts, bien inférieurs à l'échelle caractéristique d'observation correspondant plutôt au temps associé aux ions thermiques. Dans ce contexte, les électrons sont gouvernés par un modèle fluide, tandis que les ions répondent à un modèle cinétique. Le couplage entre les deux échelles se manifeste dans les termes de collision des ions sur les électrons, où l'échelle électronique apparaît sous une forme moyenne par l'intermédiaire des moments hydrodynamiques électroniques (vitesse moyenne, température).

Par ailleurs, dans la modélisation cinétique du phénomène de combustion (représentée sur la Fig.23-en bas à droite), l'échelle macroscopique correspond à l'échelle d'énergie des particules rapides (particules α) produites par réactions de fusion. L'échelle micro-

scopique est associée à l'énergie des ions thermiques, qui ont une énergie moyenne mille fois plus petite. Le couplage multi-échelle est ici en énergie. L'équation régissant l'échelle macroscopique prend ici la forme d'une advection conservative dans l'espace des vitesses suprathermiques. La fonction de distribution varie relativement lentement sur un large domaine en énergie, s'étendant jusqu'au domaine du MeV. Lorsque la composante suprathermique atteint le support en vitesse associé aux ions cibles thermiques, une composante thermique décrite à l'échelle microscopique se forme : ici, l'échelle macroscopique alimente une échelle microscopique par un terme de couplage dont la forme se déduit naturellement de la structure de l'opérateur de Fokker-Planck. L'échelle microscopique est ensuite régie par une équation modélisant l'interaction de la composante thermique associée aux particules α avec les autres fonctions de distribution thermiques.

Apport des méthodes multi-échelles mises au point

Les méthodes multi-échelles proposées permettent de simuler numériquement des couplages entre échelles complexes que l'on ne pourrait résoudre par une approche directe.

L'approche par homogénéisation de l'équation de la chaleur en milieu fissuré nous donne une méthode très générale de calcul, que l'on peut coupler facilement à un code de simulation aux éléments finis afin de modéliser un phénomène de diffusion dans un milieu très accidenté contenant des fissures microscopiques. Ceci peut s'appliquer dans de nombreux problèmes industriels où l'on s'intéresse à des phénomènes de diffusion dans des milieux multi-échelles caractérisés par la présence de fissures microscopiques dont la taille est trop petite pour envisager une approche directe : en dessous d'une certaine taille critique, il peut même devenir très difficile de construire un maillage spatial du domaine fissuré. L'approche par homogénéisation que l'on propose et que l'on justifie rigoureusement par une preuve de convergence consiste à représenter l'échelle microscopique par un terme source fonction de la largeur des fissures dans l'équation de la chaleur homogénéisée. Le modèle final est écrit dans le domaine moyen décrit à l'échelle macroscopique du problème. Un maillage raisonnable propre à décrire l'échelle macroscopique est alors suffisant pour trouver la solution homogénéisée qui constitue une bonne approximation de la solution du problème exact.

Un effet *couche limite* est également abordé dans le problème de l'homogénéisation de l'équation de la chaleur en présence de fissures droites perpendiculaires à l'axe du matériau. Le caractère multi-échelle se développe ici au voisinage d'une *interface*. Nous montrons que la solution homogénéisée et son gradient subissent un saut au voisinage de l'interface connectant les parties intègres et fissurées. Cette couche limite induit une formulation particulière du modèle homogénéisé. Le modèle final s'écrit en effet sous la forme de deux problèmes aux limites bien posés sur deux demi-espaces recouvrant l'ensemble du domaine, connectés par des conditions de transmissions pilotant la valeur de la solution et de son gradient au voisinage du bord de la fissure. Une approche par point fixe permet de montrer que le problème homogénéisé complet est bien posé et donne une méthode de construction de la solution homogénéisée que l'on exploite à des fins numériques.

On montre également que la couche limite est étroitement liée à la forme des fissures

considérées : lorsque les fissures ont une forme en pointe, la solution et son gradient restent continus. Il n'y a pas de conditions de transmission particulières à prendre en compte au niveau du modèle homogénéisé, qui prend alors la forme d'un unique problème aux limites posé sur le domaine moyen.

D'un point de vue plus théorique, on établit une preuve rigoureuse de la convergence du modèle microscopique vers le modèle homogénéisé, sans passer par les outils habituels de la théorie de l'homogénéisation. La démarche suivie consiste à construire des sommes de Riemann adaptées à la géométrie particulière du milieu fissuré périodique et à utiliser la convergence faible des suites de fonctions pour passer à la limite dans les formulations faibles.

Lorsque la largeur des fentes n'est plus fixée mais devient une variable aléatoire, le modèle limite obtenu est alors structurellement différent du cas périodique. On montre d'un point de vue formel que la solution moyenne s'exprime comme une espérance calculée à partir des solutions de problèmes microscopiques associées aux réalisations possibles du milieu fissuré. Il n'est en particulier pas possible d'interpréter la solution moyenne comme solution d'une équation limite, comme cela est le cas pour le milieu périodique. La méthode de calcul de la solution moyenne est alors différente : dans le cas général, il faut avoir recours à une simulation de type Monte Carlo pour tirer aléatoirement une configuration possible de milieu fissuré. Il faut ensuite résoudre le problème microscopique associé et prendre la moyenne d'échantillonnage des solutions de chaque problème microscopique.

On propose également une méthode d'approche pour traiter des milieux hétérogènes obéissant à une loi de comportement non-linéaire. Les configurations traitées sont plus réalistes et peuvent par exemple présenter différentes échelles d'hétérogénéités : des fissures mésoscopiques peuvent coexister avec des pores microscopiques, répartis aléatoirement. Face à une telle complexité, une approche pertinente peut être d'encadrer la loi de comportement effective du matériau. On cherche alors à établir les meilleures bornes possibles en fonction de l'information disponible relative à la statistique du milieu. Dans le cadre des lois de comportement non-linéaires, le problème est encore ouvert : différentes bornes ont été proposées, mais aucune n'a été prouvée comme étant optimale. On développe alors une méthode originale de calcul de bornes sur la conductivité effective, conduisant à un problème d'optimisation non convexe qu'il est possible de résoudre efficacement par une stratégie numérique adaptée. La méthode conduit à de nouvelles bornes, qui améliorent les estimations existantes.

Par ailleurs, la technique multi-échelle mise en place pour simuler numériquement le phénomène de combustion d'une cible FCI au niveau cinétique, permet de mettre en évidence des effets physiques nouveaux.

- Tout d'abord, pendant la phase d'implosion, la modélisation cinétique du plasma DT induit une structure de choc plus large que dans le calcul fluide. Des effets multi-espèces (comme une séparation des espèces ioniques D et T) sont naturellement présents dans la modélisation cinétique. L'approche cinétique ionique (couplée à un modèle fluide électronique) permet donc de simuler plus précisément la convergence du choc associée à la phase de conversion de l'énergie cinétique de la capsule en énergie interne. Il s'en suit une mise en condition différente de la zone centrale de la

capsule, où les libres parcours ioniques sont comparables au rayon du point chaud.

- Aussi, pendant la phase de combustion, le transport des particules α créées par réactions de fusion présente un caractère *non-local* dans le calcul cinétique où les produits de fusion sont modélisés rigoureusement par une équation de Vlasov-Fokker-Planck couplée au système d'équations cinétiques associées aux espèces thermiques. Plus précisément, la réécriture de l'opérateur de Fokker-Planck sous la forme d'un système à deux équations couplées, chacune propre à une échelle d'énergie, modélise naturellement le caractère bimodal de la fonction de distribution des particules α . L'approche cinétique multi-échelle permet ainsi de simuler finement le processus de transport et de thermalisation des particules α . Par rapport à une approche fluide où le ralentissement des particules rapides est traité de manière approximative par un modèle de diffusion, le dépôt d'énergie et d'impulsion associé aux produits de fusion se produit plus à l'extérieur du point chaud, dans une zone de thermalisation située en surface interne de la coquille de combustible dense. Il s'en suit une modification importante de la structure de la flamme de combustion, caractérisée par la présence d'un précurseur liée au transport non-local des produits de fusion. La propagation de l'onde de combustion et les performances globales de la combustion sont alors significativement impactées. Le dégagement d'énergie est beaucoup moins élevé (réduction de l'ordre de ~ 40 à $\sim 50\%$), ce qui apparaît dans les calculs cinétiques comme une conséquence directe du transport non-local des particules suprathermiques. Cet effet, mis en évidence par l'approche multi-échelle, peut en partie expliquer les difficultés rencontrées aujourd'hui dans l'atteinte de l'ignition.

Perspectives

Bien entendu, beaucoup de pistes restent encore à explorer. Les techniques multi-échelles mises au point ouvrent la voie à de nombreuses améliorations et extensions possibles.

Perspectives pour la diffusion en milieux fissurés

L'approche par homogénéisation appliquée au cas de l'équation de la chaleur dans un milieu fissuré périodique soulève de nombreuses questions quant à son application à des configurations de milieux fissurés plus complexes, où le milieu hétérogène n'est que partiellement caractérisé, ou mal connu. Ceci est d'ailleurs souvent le cas dans les problématiques industrielles (réservoir fissuré en ingénierie pétrolière, sous-sol poreux pour le problème du stockage souterrain des déchets nucléaires...).

Un exemple de cas aléatoire a été traité de manière formelle. Il reste encore à justifier rigoureusement la forme du problème homogénéisé obtenu. On peut aussi envisager d'autres configurations aléatoires, où l'angle et/ou la profondeur des fissures deviennent des variables aléatoires.

Extensions de l'approche cinétique multi-échelle

La méthode multi-échelle développée pour simuler au niveau cinétique la combustion de cibles FCI réalistes peut être étendue afin d'inclure des effets physiques plus fins, négligés jusqu'à présent.

On peut tout d'abord chercher à étendre le formalisme bimodal mis au point pour les particules α afin d'inclure l'effet des collisions à *grand angle*. Ce mécanisme collisionnel génère une composante suprathermique pour les ions D,T si ceux-ci entrent en collision avec une particule α rapide. Ce type de collisions ne peut plus se modéliser par un opérateur de Fokker-Planck, seulement applicable lorsque les collisions correspondent à une succession de petites collisions à faible déviation angulaire. Il faut alors revenir à la forme générale de Boltzmann, que l'on peut simplifier en tenant compte du fait que l'énergie initiale de la particule thermique est très petite devant l'énergie de la particule α suprathermique. Le terme source alimentant une composante suprathermique pour les espèces ioniques D et T prend alors la forme d'un moment particulier de la composante suprathermique de la fonction de distribution des particules α . La prise en compte d'un tel effet peut se faire dans la continuité naturelle de l'architecture du code cinétique FUSE déjà mise en place, chaque espèce ionique étant représentée par une composante thermique couplée à une composante suprathermique.

Une autre extension possible est de coupler la modélisation cinétique multi-échelle développée pour les particules α avec une modélisation fluide pour des espèces ioniques très collisionnelles. Ceci peut par exemple avoir un intérêt pour pouvoir étendre le domaine spatial des simulations cinétiques effectuées sur des capsules FCI en incluant l'ablateur en CH traité de manière cohérente avec le combustible DT. Ce type d'approche hybride peut permettre d'inclure plus d'espèces ioniques afin d'améliorer la représentativité des simulations cinétiques, sans pour autant générer des temps calculs prohibitifs.

Cette contribution à l'étude de quelques problèmes multi-échelles se situe ainsi à la croisée entre différentes disciplines : on a cherché à s'appuyer sur différents concepts issus de l'analyse mathématique (théorie de l'homogénéisation), de la physique des plasmas (équation de Vlasov-Fokker-Planck), de l'algorithmique (résolution numérique), afin de proposer des méthodes originales permettant de modéliser et de simuler soigneusement des couplages fins entre les échelles caractéristiques. Les développements effectués peuvent ainsi permettre d'apporter des éléments de réponses à des problèmes industriels complexes en lien avec les enjeux énergétiques de demain où l'aspect multi-échelle joue un rôle crucial.

A

Calcul de la partie explicite des fonctions de distribution thermiques

Pour le choix de la partie explicite f_M , un compromis est à trouver entre une bonne représentation de la fonction de distribution complète f (absorbant un maximum de la dépendance en vitesse afin d'annuler la partie résiduelle sur les bords du domaine de calcul), et une certaine simplicité permettant le calcul analytique des potentiels. En pratique, on choisit une forme s'appuyant sur la Maxwellienne locale, conservant les moments de f jusqu'à l'ordre $n = 4$ ²⁰.

On développe ainsi la partie explicite comme suit :

$$\begin{aligned} f_M(u, \mu) &= \sum_{n=0}^4 (f_{Mn} X_n(u) + f_{Mn}^* X_n^*(u)) P_n(\mu) \\ S_M(u, \mu) &= 2T \sum_{n=0}^4 (f_{Mn} H_n(u) + f_{Mn}^* H_n^*(u)) P_n(\mu) \\ T_M(u, \mu) &= 4T^2 \sum_{n=0}^4 (f_{Mn} K_n(u) + f_{Mn}^* K_n^*(u)) P_n(\mu) \end{aligned}$$

où l'on a posé :

$$u = \left(\frac{(v_x - V)^2 + v_\perp^2}{2T} \right)^{\frac{1}{2}} \quad \text{et} \quad \mu = \frac{v_x - V}{u\sqrt{2T}}$$

Les fonctions radiales choisies pour f_M sont

$$X_n(u) = u^n e^{-u^2} \quad \text{et} \quad X_n^*(u) = u^{n+2} e^{-u^2}$$

Les fonctions radiales associées à \mathcal{S} et \mathcal{T} sont les fonctions H_n , H_n^* , K_n et K_n^* , solutions

20. Tous les moments jusqu'à l'ordre trois doivent de toutes façons être calculées, afin d'estimer le flux de chaleur qui est une grandeur physique d'intérêt dans le problème traité.

des équations de Poisson :

$$\begin{aligned} \frac{1}{u^2} \frac{\partial}{\partial u} \left(u^2 \frac{\partial H_n}{\partial u} \right) - \frac{n(n+1)}{u^2} H_n &= X_n \\ \frac{1}{u^2} \frac{\partial}{\partial u} \left(u^2 \frac{\partial H_n^*}{\partial u} \right) - \frac{n(n+1)}{u^2} H_n^* &= X_n^* \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} \frac{1}{u^2} \frac{\partial}{\partial u} \left(u^2 \frac{\partial K_n}{\partial u} \right) - \frac{n(n+1)}{u^2} K_n &= H_n \\ \frac{1}{u^2} \frac{\partial}{\partial u} \left(u^2 \frac{\partial K_n^*}{\partial u} \right) - \frac{n(n+1)}{u^2} K_n^* &= H_n^* \end{aligned}$$

Les fonctions H_n, K_n, H_n^* et K_n^* s'obtiennent alors par intégration des équations précédentes.

Les contributions explicites des dérivées des potentiels intervenant dans l'expression des termes de ralentissement se développent ainsi de la façon suivante :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{S}_M}{\partial v_x} &= \sqrt{2T} \sum_{n=0}^4 f_{Mn} \left(\frac{dH_n}{du} \mu P_n + \frac{H_n}{u} (1 - \mu^2) P'_n \right) + (\dots f_{Mn}^* \dots) \\ \frac{\partial \mathcal{S}_M}{\partial v_\perp} &= \sqrt{2T} \frac{u_\perp}{u} \sum_{n=0}^4 f_{Mn} \left(\frac{dH_n}{du} P_n - \frac{H_n}{u} \mu P'_n \right) + (\dots f_{Mn}^* \dots) \\ \frac{\partial^2 \mathcal{T}_M}{\partial v_x^2} &= 2T \sum_{n=0}^4 f_{Mn} \left(H_n \mu^2 P_n + \frac{1}{u} \frac{dK_n}{du} [(1 - 3\mu^2) P_n + 2\mu(1 - \mu^2) P'_n] \right. \\ &\quad \left. + \frac{K_n}{u^2} [n(n+1)(2\mu^2 - 1) P_n - \mu(1 - \mu^2) P'_n] \right) + (\dots f_{Mn}^* \dots) \\ \frac{\partial^2 \mathcal{T}_M}{\partial v_x \partial v_\perp} &= 2T \frac{u_\perp}{u} \sum_{n=0}^4 f_{Mn} \left(H_n \mu P_n + \frac{1}{u} \frac{dK_n}{du} [(1 - 2\mu^2) P'_n - 3\mu P_n] \right. \\ &\quad \left. + \frac{K_n}{u^2} [2n(n+1)\mu P_n - (1 - \mu^2) P'_n] \right) + (\dots f_{Mn}^* \dots) \\ \frac{\partial^2 \mathcal{T}_M}{\partial v_\perp^2} &= 2T \sum_{n=0}^4 f_{Mn} \left(H_n (1 - \mu^2) P_n - \frac{1}{u} \frac{dK_n}{du} [(2 - 3\mu^2) P_n + 2\mu(1 - \mu^2) P'_n] \right. \\ &\quad \left. + \frac{K_n}{u^2} [n(n+1)(1 - 2\mu^2) P_n + \mu(2 - \mu^2) P'_n] \right) + (\dots f_{Mn}^* \dots) \end{aligned}$$

où les termes nécessaires pour évaluer ces expressions sont donnés par :
pour $n \geq 0$:

$$\begin{aligned} H_n(u) &= \frac{u^{n-2}}{4} \text{ch}_n(u) \quad ; \quad \frac{dH_n}{du} = \frac{u^{n-1}}{2} \left(\frac{n}{2u^2} \text{ch}_n(u) - \text{ch}_{n+1}(u) \right) \\ H_n^*(u) &= \frac{u^n}{4} \text{ch}_{n+1}(u) + \frac{u^{n-2}}{4} \text{ch}_n(u) \quad ; \quad \frac{dH_n^*}{du} = \frac{nu^{n-1}}{4} \left(\frac{\text{ch}_n(u)}{u^2} + \text{ch}_{n+1}(u) \right) - \frac{u^{n+1}}{2} \text{ch}_{n+2}(u) \end{aligned}$$

et pour $n \geq 1$:

$$\begin{aligned}
\frac{K_n(u)}{u^2} &= \frac{u^{n-4}}{16} (\text{ch}_n(u) - \text{ch}_{n-1}(u)) \\
\frac{1}{u} \frac{dK_n}{du} &= \frac{u^{n-4}}{16} ((n-1)\text{ch}_{n-1}(u) - (n+1)\text{ch}_n(u)) \\
\frac{K_n^*(u)}{u^2} &= \frac{u^{n-4}}{16} \left(\frac{2n+5}{2} \text{ch}_n(u) - \frac{2n+3}{2} \text{ch}_{n-1}(u) \right) \\
\frac{1}{u} \frac{dK_n^*}{du} &= \frac{u^{n-2}}{16} \left(\frac{(2n+3)(n-1)}{2n-1} \text{ch}_n(u) - \frac{(2n+5)(n+1)}{2n+1} \text{ch}_{n+1}(u) + \frac{8n}{(2n-1)(2n+1)} e^{-u^2} \right)
\end{aligned}$$

Dans ces expressions, on a fait apparaître la suite de fonctions définie par la récurrence suivante :

$$\begin{aligned}
\text{ch}_0(u) &= -u\sqrt{\pi}\text{erf}(u) \\
\text{ch}_{n+1}(u) &= e^{-u^2} + \frac{2n+1}{2u^2} \text{ch}_n(u)
\end{aligned}$$

On a pour ces fonctions :

$$\frac{d}{du} \text{ch}_n(u) = -2ue^{-u^2} - \frac{2n-1}{u} \text{ch}_n(u) = \frac{2}{u} \text{ch}_n(u) - 2u \text{ch}_{n+1}(u)$$

et

$$\frac{2n+1}{2u^2} \text{ch}_n(u) - \frac{2n-1}{2u^2} \text{ch}_{n-1}(u) = \text{ch}_{n+1}(u) - \text{ch}_n(u)$$

En outre, en égalisant les moments de f_M avec ceux de f , suivant les relations (6.5), on obtient les égalités suivantes, permettant de calculer les coefficients f_{Mn} du développement de la partie explicite f_M :

$$\begin{aligned}
f_{M0} + \frac{3}{2} f_{M0}^* &= \frac{M_0^0}{(2\pi T)^{3/2}} = \frac{n}{(2\pi T)^{3/2}} \\
f_{M0} + \frac{5}{2} f_{M0}^* &= \frac{2M_0^2}{3\pi^{3/2}(2T)^{5/2}} = \frac{n}{(2\pi T)^{3/2}} \\
f_{M1} + \frac{5}{2} f_{M1}^* &= \frac{M_1^1}{6\pi^{3/2}T^2} = 0 \text{ dans le référentiel des ions} \\
f_{M1} + \frac{7}{2} f_{M1}^* &= \frac{M_1^3}{30\pi^{3/2}T^3} = \frac{Q}{5\pi^{3/2}T^3} \\
f_{M2} + \frac{7}{2} f_{M2}^* &= \frac{4M_2^2}{15\pi^{3/2}(2T)^{5/2}} = \frac{4n(T_{\parallel} - T_{\perp})}{3\pi^{3/2}(2T)^{5/2}} \\
f_{M2} + \frac{9}{2} f_{M2}^* &= \frac{4M_2^4}{105\pi^{3/2}(2T)^{5/2}T^3} \\
f_{M3} + \frac{9}{2} f_{M3}^* &= \frac{M_3^3}{105\pi^{3/2}T^3} = \frac{2Q_{\parallel} - 3Q_{\perp}}{15\pi^{3/2}T^3} \\
f_{M4} + \frac{11}{2} f_{M4}^* &= \frac{16M_4^4}{945\pi^{3/2}(2T)^{7/2}}
\end{aligned}$$

Dans les expressions précédentes, n correspond à la densité de particules associée à f , T_{\parallel} et T_{\perp} sont les températures ioniques parallèle et perpendiculaire, reliées à la température totale par $T = (T_{\parallel} + 2T_{\perp})/3$, Q est le flux de chaleur ionique, scindé en deux parties, $Q_{\parallel} = \frac{1}{2} \int (v_x - V)^3 f(\vec{v}) d^3v$ et $Q_{\perp} = \frac{1}{2} \int (v_x - V) v_{\perp}^2 f(\vec{v}) d^3v$, correspondant aux flux parallèles et perpendiculaires respectivement.

On obtient finalement :

$$\begin{aligned}
 f_{M0} &= \frac{n}{(2\pi T)^{3/2}} \\
 f_{M0}^{\star} &= 0 \\
 f_{M1} &= -\frac{Q}{(2\pi^{3/2} T^3)} \\
 f_{M1}^{\star} &= -\frac{2}{5} f_{M1} \\
 f_{M2} &= \frac{2}{3\pi^{3/2} (2T)^{5/2}} \left(9n(T_{\parallel} - T_{\perp}) - \frac{M_2^4}{5T} \right) \\
 f_{M2}^{\star} &= \frac{4}{3\pi^{3/2} (2T)^{5/2}} \left(\frac{M_2^4}{35T} - n(T_{\parallel} - T_{\perp}) \right) \\
 f_{M3} &= \frac{2Q_{\parallel} - 3Q_{\perp}}{15\pi^{3/2} T^3} \\
 f_{M3}^{\star} &= 0 \\
 f_{M4} &= \frac{16M_4^4}{945\pi^{3/2} (2T)^{7/2}} \\
 f_{M4}^{\star} &= 0
 \end{aligned}$$

B

Discrétisation des termes de Fokker-Planck pour la composante thermique

Les coefficients de l'équation discrétisée correspondant aux dérivés en v_x (du premier et second ordre) sont donnés par :

$$\begin{aligned}
 \alpha s_{j,k} &= \frac{\delta t}{2\delta v_x} \left((1 - \delta_{xj+\frac{1}{2},k}) B_{xj+\frac{1}{2},k} + \frac{1}{\delta v_x} C_{xxj+\frac{1}{2},k} \right) \\
 \alpha p_{j,k} &= \frac{\delta t}{2\delta v_x} \left(\delta_{xj+\frac{1}{2},k} B_{xj+\frac{1}{2},k} - (1 - \delta_{xj-\frac{1}{2},k}) B_{xj-\frac{1}{2},k} - \frac{1}{\delta v_x} (C_{xxj+\frac{1}{2},k} + C_{xxj-\frac{1}{2},k}) \right) \\
 \alpha i_{j,k} &= \frac{\delta t}{2\delta v_x} \left(-\delta_{xj-\frac{1}{2},k} B_{xj-\frac{1}{2},k} + \frac{1}{\delta v_x} C_{xxj-\frac{1}{2},k} \right)
 \end{aligned} \tag{B.1}$$

Les coefficients correspondant aux dérivées en v_\perp (du premier et second ordre) sont définis par :

$$\begin{aligned}
 \beta s_{j,k} &= \frac{\delta t v_{\perp k+\frac{1}{2}}}{2v_{\perp k} \delta v_\perp} \left((1 - \delta_{\perp j,k+\frac{1}{2}}) B_{\perp j,k+\frac{1}{2}} + \frac{1}{\delta v_\perp} C_{\perp\perp j,k+\frac{1}{2}} \right) \\
 \beta p_{j,k} &= \frac{\delta t v_{\perp k+\frac{1}{2}}}{2v_{\perp k} \delta v_\perp} \left(\delta_{\perp j,k+\frac{1}{2}} B_{\perp j,k+\frac{1}{2}} - \frac{1}{\delta v_\perp} C_{\perp\perp j,k+\frac{1}{2}} \right) \\
 &\quad - \frac{\delta t v_{\perp k-\frac{1}{2}}}{2v_{\perp k} \delta v_\perp} \left((1 - \delta_{\perp j,k-\frac{1}{2}}) B_{\perp j,k-\frac{1}{2}} + \frac{1}{\delta v_\perp} C_{\perp\perp j,k-\frac{1}{2}} \right) \\
 \beta i_{j,k} &= \frac{\delta t v_{\perp k-\frac{1}{2}}}{2v_{\perp k} \delta v_\perp} \left(-\delta_{\perp j,k-\frac{1}{2}} B_{\perp j,k-\frac{1}{2}} + \frac{1}{\delta v_\perp} C_{\perp\perp j,k-\frac{1}{2}} \right)
 \end{aligned} \tag{B.2}$$

Enfin, les coefficients impliquant les dérivées croisées vérifient :

$$\begin{aligned}
\sigma_{j,k} &= \frac{\delta t}{4\delta v_x \delta v_\perp} \left((1 - \delta_{xj+\frac{1}{2},k})(f_{j+1,k+1} - f_{j+1,k-1}) + \delta_{xj+\frac{1}{2},k}(f_{j,k+1} - f_{j,k-1}) \right) C_{x\perp j+\frac{1}{2},k} \\
&- \frac{\delta t}{4\delta v_x \delta v_\perp} \left((1 - \delta_{xj-\frac{1}{2},k})(f_{j,k+1} - f_{j,k-1}) + \delta_{xj-\frac{1}{2},k}(f_{j-1,k+1} - f_{j-1,k-1}) \right) C_{x\perp j-\frac{1}{2},k} \\
&+ \frac{\delta t v_{\perp k+\frac{1}{2}}}{4\delta v_x \delta v_\perp v_{\perp k}} \left((1 - \delta_{\perp j,k+\frac{1}{2}})(f_{j+1,k+1} - f_{j-1,k+1}) + \delta_{\perp j,k+\frac{1}{2}}(f_{j+1,k} - f_{j-1,k}) \right) C_{x\perp j,k+\frac{1}{2}} \\
&- \frac{\delta t v_{\perp k-\frac{1}{2}}}{4\delta v_x \delta v_\perp v_{\perp k}} \left((1 - \delta_{\perp j,k-\frac{1}{2}})(f_{j+1,k} - f_{j-1,k}) + \delta_{\perp j,k-\frac{1}{2}}(f_{j+1,k-1} - f_{j-1,k-1}) \right) C_{x\perp j,k-\frac{1}{2}}
\end{aligned}$$

Dans les expressions précédentes, les facteurs B et C sont liés aux dérivées en vitesse des potentiels de Rosenbluth :

$$\begin{aligned}
B_{xj+\frac{1}{2},k} &= \frac{S_{j+1,k} - S_{j,k}}{\delta v_x} \\
B_{xj,k+\frac{1}{2}} &= \frac{S_{j+1,k+1} + S_{j+1,k} - S_{j-1,k+1} - S_{j-1,k}}{4\delta v_x} \\
B_{\perp j+\frac{1}{2},k} &= \frac{S_{j+1,k+1} + S_{j,k+1} - S_{j+1,k-1} - S_{j,k-1}}{4\delta v_\perp} \\
B_{\perp j,k+\frac{1}{2}} &= \frac{S_{j,k+1} - S_{j,k}}{\delta v_\perp} \\
C_{xxj+\frac{1}{2},k} &= \frac{-T_{j+2,k} + T_{j+1,k} + T_{j,k} - T_{j-1,k}}{2\delta v_x^2} \\
C_{xxj,k+\frac{1}{2}} &= \frac{-T_{j+1,k+1} - T_{j+1,k} + 2T_{j,k+1} + 2T_{j,k} - T_{j-1,k+1} - T_{j-1,k}}{2\delta v_x^2} \\
C_{\perp\perp j+\frac{1}{2},k} &= \frac{-T_{j+1,k+1} - T_{j,k+1} + 2T_{j+1,k} + 2T_{j,k} - T_{j+1,k-1} - T_{j,k-1}}{2\delta v_\perp^2} \\
C_{\perp\perp j,k+\frac{1}{2}} &= \frac{-T_{j,k+2} + T_{j,k+1} + T_{j,k} - T_{j,k-1}}{2\delta v_\perp^2} \\
C_{x\perp j+\frac{1}{2},k} &= \frac{-T_{j+1,k+1} + T_{j,k+1} + T_{j+1,k-1} - T_{j,k-1}}{2\delta v_x \delta v_\perp} \\
C_{x\perp j,k+\frac{1}{2}} &= \frac{-T_{j+1,k+1} + T_{j+1,k} + T_{j-1,k+1} - T_{j-1,k}}{2\delta v_x \delta v_\perp}
\end{aligned}$$

On introduit également les pondérations de type Chang et Cooper [19] :

$$\begin{aligned}
\delta_{xj+\frac{1}{2},k} &= \frac{1}{w_{xj+\frac{1}{2},k}} - \frac{1}{e^{w_{xj+\frac{1}{2},k}} - 1} \\
\delta_{\perp j,k+\frac{1}{2}} &= \frac{1}{w_{\perp j,k+\frac{1}{2}}} - \frac{1}{e^{w_{\perp j,k+\frac{1}{2}}} - 1}
\end{aligned}$$

définies de sorte que la fonction de distribution Maxwellienne discrétisée sur le maillage en vitesse soit bien solution d'équilibre du schéma numérique.

C

Extensions de l'approche multi-échelle du couplage thermique/suprathermique

C.1 Prise en compte des collisions à grand angle

C.1.1 Motivation

La méthode multi-échelle développée pour simuler au niveau cinétique la combustion de cibles FCI réalistes peut être étendue afin d'inclure des effets physiques plus fins, négligés jusqu'à présent. On peut tout d'abord chercher à étendre le formalisme bimodal mis au point pour les particules α afin d'inclure l'effet des collisions à *grand angle*. Ce mécanisme collisionnel génère une composante suprathermique pour les ions D,T si ceux-ci entrent en collision avec une particule α rapide, suivant le mécanisme : $D + \alpha \rightarrow D^* + \alpha$. Après la collision, l'ion D^* est caractérisé par une énergie du domaine suprathermique (de l'ordre du MeV). Ce type de collisions ne peut plus se modéliser par un opérateur de Fokker-Planck, seulement applicable lorsque les collisions correspondent à une succession de petites déviations angulaires. Il faut alors revenir à la forme générale de Boltzmann.

C.1.2 Notations

On considère deux ensembles de particules désignés par les indices 1 et 2 (les deux ensembles peuvent éventuellement être de nature identique). Soient $f_1(\vec{r}, \vec{v})$ et $f_2(\vec{r}, \vec{v})$ les fonctions de distribution associées. Le taux de collision des particules 1 sur les particules 2 au point \vec{r} est proportionnel au produit des fonctions de distribution $f_1(\vec{r}, \vec{v}_1)f_2(\vec{r}, \vec{v}_2)$. On désigne les vitesses des deux particules par \vec{v}_1 et \vec{v}_2 puisque les particules n'ont pas nécessairement la même vitesse pour rentrer en collision.

Remarquons que les deux particules n'ont pas non plus besoin d'être rigoureusement au même point de l'espace : les particules peuvent en effet entrer en collision à partir du moment où la distance qui les sépare devient inférieure à la longueur de Debye. Néanmoins, pour simplifier l'écriture générale du terme de collision, on suppose que les deux particules sont au même point \vec{r} .

Les vitesses \vec{v}_1 et \vec{v}_2 désignent les vitesses *avant* collision, tandis que \vec{v}'_1 et \vec{v}'_2 sont les vitesses *après* collision.

On définit \vec{v} (resp. \vec{v}') la vitesse relative avant (resp. après) collision et \vec{V} (resp. \vec{V}') la vitesse du centre de masse avant (resp. après) collision.

On rappelle que les vitesses relatives et du centre de masse sont données par :

$$\begin{cases} \vec{v} = \vec{v}_1 - \vec{v}_2, \\ \vec{V} = (m_1\vec{v}_1 + m_2\vec{v}_2) / M, \end{cases} \quad (\text{C.1})$$

où $M = m_1 + m_2$ est la masse totale, tandis que les vitesses absolues vérifient :

$$\begin{cases} \vec{v}_1 = \vec{V} + (m_2/M) \vec{v}, \\ \vec{v}_2 = \vec{V} - (m_1/M) \vec{v}. \end{cases} \quad (\text{C.2})$$

La collision s'exprime en effet plus simplement à l'aide des vitesses (\vec{v}, \vec{V}) . La section efficace de collision s'écrit dans cette paramétrisation selon :

$$\sigma = \sigma(v, \vec{v} \cdot \vec{v}').$$

C.1.3 Forme générale du terme de Boltzmann

Le taux de collision correspondant à la diffusion de particules de type 1 en dehors du volume élémentaire de l'espace des vitesses d^3v_1 , due à des collisions sur des particules de type 2 situées dans le volume d^3v_2 , et conduisant à un état final caractérisé par une vitesse relative située dans d^3v' et une vitesse du centre de masse dans d^3V' est donné par :

$$f_1(\vec{r}, \vec{v}_1) f_2(\vec{r}, \vec{v}_2) d^3v_1 d^3v_2 v \sigma(v, \vec{v} \cdot \vec{v}') \delta(v - v') (d^3v' / v^2) \delta(\vec{V} - \vec{V}') d^3V'. \quad (\text{C.3})$$

Les fonctions Dirac expriment les relations de conservation associées au processus de collision :

- Le premier Dirac exprime la conservation de la vitesse relative,
- Le second traduit la conservation du vecteur vitesse du centre de masse.

On peut exprimer le taux de collision (C.3) à l'aide des vitesses absolues finales \vec{v}'_1 et \vec{v}'_2 , en tenant compte de la conservation des volumes élémentaires dans l'espace des vitesses :

$$d^3v' d^3V' = d^3v'_1 d^3v'_2,$$

on arrive à :

$$f_1(\vec{r}, \vec{v}_1) f_2(\vec{r}, \vec{v}_2) d^3v_1 d^3v_2 \left(\frac{1}{v} \right) \sigma(v, \vec{v} \cdot \vec{v}') \delta(v - v') \delta(\vec{V} - \vec{V}') d^3v'_1 d^3v'_2. \quad (\text{C.4})$$

Dans cette dernière expression, les variables associées au centre de masse sont vues comme des fonctions des vitesses absolues $\vec{v}_1, \vec{v}_2, \vec{v}'_1, \vec{v}'_2$. A partir de l'expression (C.4) du taux de collision, on peut écrire la forme générale du terme de Boltzmann modélisant l'effet des collisions à grand angle sur l'espèce de type 1 caractérisée par une fonction de distribution $f_1(\vec{r}, \vec{v}_1)$. Considérons pour cela un groupe de particules localisées dans un élément de

volume de l'espace des vitesses d^3v_1 . L'effet des collisions à grand angle est d'une part de diffuser des particules hors du volume élémentaire d^3v_1 , et d'autre part d'amener des particules dans le volume d^3v_1 . Le taux de collisions diffusant les particules à l'extérieur de d^3v_1 est, par unité de volume de l'espace des phases $d^3rd^3v_1$:

$$f_1(\vec{r}, \vec{v}_1) \int \int \int f_2(\vec{r}, \vec{v}_2) (1/v) \sigma \delta(v - v') \delta(\vec{V} - \vec{V}') d^3v_2 d^3v'_1 d^3v'_2. \quad (\text{C.5})$$

En outre, le taux de collision (C.4) correspond au processus collisionnel amenant les particules dans le volume $d^3v'_1$. Pour connaître le taux de collision amenant les particules dans l'élément de volume d^3v_1 , il suffit d'intervertir les variables avec un prime et celles sans prime, en remarquant le fait que les fonctions v , σ et les fonctions Dirac sont symétriques par rapport au changement de variable $v \longleftrightarrow v'$. Le taux de collision amenant les particules dans le volume élémentaire cible d^3v_1 est ainsi, exprimé par unité de volume de l'espace des phases $d^3rd^3v_1$:

$$f_1(\vec{r}, \vec{v}'_1) \int \int \int f_2(\vec{r}, \vec{v}_2) (1/v) \sigma \delta(v - v') \delta(\vec{V} - \vec{V}') d^3v_2 d^3v'_1 d^3v'_2. \quad (\text{C.6})$$

Finalement, le terme de Boltzmann modélisant l'effet des collisions à grand angle de l'espèce de type 1 sur l'espèce de type 2 est donné par la forme générale suivante :

$$\left. \frac{\partial f_1(\vec{r}, \vec{v}_1)}{\partial t} \right]_{12} = \int \int \int [f_1(\vec{r}, \vec{v}'_1) f_2(\vec{r}, \vec{v}'_2) - f_1(\vec{r}, \vec{v}_1) f_2(\vec{r}, \vec{v}_2)] (1/v) \sigma(v, \vec{v} \cdot \vec{v}) \delta(v - v') \delta(\vec{V} - \vec{V}') d^3v_2 d^3v'_1 d^3v'_2. \quad (\text{C.7})$$

C.1.4 Simplification pour une cible thermique

On cherche à simplifier l'écriture générale du terme de collision (C.7) en prenant en compte les fonctions Dirac dans les intégrations. De plus, on fait l'hypothèse supplémentaire que les particules test (de type 1) sont distribuées suivant un Dirac en vitesse localisé autour d'une certaine vitesse de référence \vec{v}_0 :

$$f_1(\vec{v}_1) = \delta(\vec{v}_1 - \vec{v}_0). \quad (\text{C.8})$$

Cette forme est pertinente pour traiter le cas des particules thermiques thermiques (D ou T) excitées par collision sur une particule α suprathermique. Du point de vue de la particule suprathermique, la vitesse de la particule thermique cible apparaît très petite et peut être raisonnablement approchée par une fonction Dirac en vitesse. Dans ce cas, l'intégrale de Boltzmann se simplifie avantageusement.

Considérons tout d'abord la partie de l'opérateur correspondant à l'arrivée de particules dans le volume cible d^3v_1 . En appelant I le terme correspondant, on a :

$$I(\vec{v}_1) = \int \int \int \delta(\vec{v}'_1 - \vec{v}_0) f_2(\vec{v}'_2) \frac{\sigma}{v'} \delta(v' - v) \delta(\vec{V}' - \vec{V}) d^3v_2 d^3v' d^3V', \quad (\text{C.9})$$

où l'on a omis les variables d'espace pour alléger les notations et où l'on a remplacé l'élément de volume $d^3v'_1 d^3v'_2$ par $d^3v' d^3V'$. Les fonctions Dirac dépendent en effet directement de la vitesse relative et de la vitesse du centre de masse.

Dans l'intégrale (C.9), \vec{v}_1 et \vec{v}_0 sont fixés et $\vec{v}_2, \vec{v}', \vec{V}'$ sont les variables d'intégration en fonction desquelles on peut exprimer toutes les autres variables. Par exemple :

$$\vec{v}_2' = \vec{v}_1' - \vec{v}'.$$

La présence du terme en Dirac $\delta(\vec{v}_1' - \vec{v}_0)$ implique que l'on peut remplacer \vec{v}_1' par \vec{v}_0 dans l'intégrale (C.9). On peut alors effectuer les substitutions suivantes dans l'intégrale (C.9) :

$$\vec{v}_2' \rightarrow \vec{v}_0 - \vec{v}' \quad f_2(\vec{v}_2') \rightarrow f_2(\vec{v}_0 - \vec{v}'). \quad (\text{C.10})$$

Par ailleurs, la section efficace est donnée par l'expression de Rutherford :

$$\sigma = \frac{Z_1^2 Z_2^2 e^4}{4m^2 v^4 \sin^2(\theta/2)},$$

où θ est l'angle de diffusion exprimé dans le centre de masse (voir Fig. C.1), tandis que $m = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ est la masse réduite. La présence du terme $\delta(v - v')$ force les vecteurs relatifs \vec{v} et \vec{v}' à avoir la même norme, de sorte que (voir Fig.C.1) :

$$2v \sin(\theta/2) = \|\vec{v}' - \vec{v}\|.$$

Ainsi, l'expression de la section efficace de collision devient :

$$\sigma = \frac{4Z_1^2 Z_2^2 e^4}{m^2 \|\vec{v}' - \vec{v}\|^4}. \quad (\text{C.11})$$

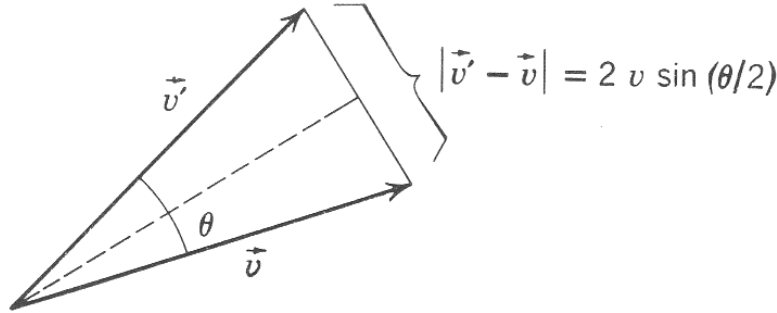


FIGURE C.1 – Relation entre la variation de vitesse et l'angle de déviation dans une collision à grand angle.

Il s'agit ensuite d'exprimer \vec{v} en fonction des variables d'intégration. Pour ce faire, on remarque que :

$$\vec{v}_1 = \vec{V} + (m_2/M) \vec{v},$$

où $M = m_1 + m_2$ est la masse totale. En outre, les fonctions Dirac indiquent que l'on peut faire les substitutions suivantes :

$$\vec{v}_0 \leftarrow \vec{v}_1' = (\vec{V}' + (m_2/M) \vec{v}') \rightarrow (\vec{V} + (m_2/M) \vec{v}').$$

Par soustraction, on arrive à :

$$\vec{v} - \vec{v}' = (M/m_2) \Delta \vec{v}_1, \quad (\text{C.12})$$

où $\Delta \vec{v}_1 = (\vec{v}_1 - \vec{v}_0)$ correspond au changement de vitesse de la particule test, initialement caractérisée par un vecteur vitesse \vec{v}_0 , et par un \vec{v}_1 après collision. $\Delta \vec{v}_1$ est fixé dans l'intégrale (C.9). Par conséquent, la section efficace de diffusion :

$$\sigma = \left(\frac{m_2}{M}\right)^4 \left(\frac{4Z_1^2 Z_2^2 e^4}{m^2 \|\Delta \vec{v}_1\|^4} \right)$$

est constante pour $\Delta \vec{v}_1$ fixé et peut donc être sortie de l'intégrale (C.9). On peut ensuite effectuer l'intégration sur $d^3 V'$, en tenant compte du Dirac $\delta(\vec{V} - \vec{V}')$. On obtient ainsi :

$$I(\vec{v}_0, \Delta \vec{v}_1) = \left(\frac{m_2}{M}\right)^4 \frac{4Z_1^2 Z_2^2 e^4}{m^2 \|\Delta \vec{v}_1\|^4} \int \int \delta(\vec{v}'_1 - \vec{v}_0) f_2(\vec{v}_0 - \vec{v}') \frac{\delta(v - v')}{v} d^3 v_2 d^3 v'. \quad (\text{C.13})$$

Dans l'équation précédente, la variable v est en fait une fonction de \vec{v}' et de $\Delta \vec{v}_1$. En reprenant l'expression (C.12) définissant la déviation en vitesse $\Delta \vec{v}_1$, on a en effet :

$$\vec{v} = \vec{v}' + (M/m_2) \Delta \vec{v}_1. \quad (\text{C.14})$$

Ensuite, on effectue l'intégration sur $d^3 v_2$. La première fonction Dirac $\delta(\vec{v}'_1 - \vec{v}_0)$ dépend en fait de \vec{v}_2 de façon cachée. On a en effet :

$$\begin{aligned} \vec{v}'_1 &= \vec{V}' + \frac{m_2}{M} \vec{v}' \\ &= \vec{V} + \frac{m_2}{M} \vec{v}' \\ &= \frac{m_1}{M} \vec{v}_1 + \frac{m_2}{M} \vec{v}_2 + \frac{m_2}{M} \vec{v}'. \end{aligned} \quad (\text{C.15})$$

Par conséquent, la fonction Dirac s'exprime de la façon suivante :

$$\begin{aligned} \delta(\vec{v}'_1 - \vec{v}_0) &= \delta\left(\frac{m_1}{M} \vec{v}_1 + \frac{m_2}{M} \vec{v}_2 + \frac{m_2}{M} \vec{v}' - \vec{v}_0\right) \\ &= \left(\frac{M}{m_2}\right)^3 \delta\left(\vec{v}_2 + \frac{m_1}{m_2} \vec{v}_1 + \vec{v}' - \frac{M}{m_2} \vec{v}_0\right) \end{aligned} \quad (\text{C.16})$$

Les autres termes de l'intégrale (C.13) ne dépendent pas de \vec{v}_2 . On obtient donc, après l'intégration sur \vec{v}_2 :

$$I(\vec{v}_0, \Delta \vec{v}_1) = \frac{m_2}{M} \frac{4Z_1^2 Z_2^2 e^4}{m^2 \|\Delta \vec{v}_1\|^4} \int f_2(\vec{v}_0 - \vec{v}') \frac{\delta(v - v')}{v'} d^3 v', \quad (\text{C.17})$$

où le vecteur \vec{v} s'exprime en fonction du vecteur \vec{v}' suivant (C.14).

Il est encore possible de réduire la forme (C.17) en exprimant différemment le Dirac $\delta(v - v')$. Les variables v et v' étant toujours positives, on a :

$$\frac{\delta(v - v')}{v'} = 2\delta(v^2 - v'^2).$$

En outre, en utilisant la relation (C.14), on a :

$$v^2 - v'^2 = 2\vec{v}' \cdot \left(\frac{M}{m_2} \Delta \vec{v}_1 \right) + \left(\frac{M}{m_2} \Delta \vec{v}_1 \right)^2$$

Il est à ce stade plus commode d'introduire le vecteur \vec{u} , lié au vecteur \vec{v}' par :

$$\vec{v}' = -\vec{u} - \frac{1}{2} (M/m_2) \Delta \vec{v}_1,$$

de sorte que le terme en Dirac s'exprime plus simplement en fonction de \vec{u} , selon :

$$\begin{aligned} \frac{\delta(v - v')}{v'} &= 2\delta \left(-2\frac{M}{m_2} \vec{u} \cdot \Delta \vec{v}_1 \right) \\ &= \frac{m_2}{M} \delta(\vec{u} \cdot \Delta \vec{v}_1) \\ &= \frac{m_2}{M} \frac{1}{\|\Delta \vec{v}_1\|} \delta(u_{\parallel}), \end{aligned} \quad (\text{C.18})$$

où u_{\parallel} est la composante de \vec{u} parallèle au vecteur fixé $\Delta \vec{v}_1$. Ainsi, l'intégrale (C.17) sur d^3v' se réduit, compte tenu du terme en $\delta(u_{\parallel})$ à une intégrale sur le plan $u_{\parallel} = 0$:

$$I(\vec{v}_0, \Delta \vec{v}_1) = \frac{4Z_1^2 Z_2^2 e^4}{m_1^2 \|\Delta \vec{v}_1\|^5} \int_{\vec{u} \perp \Delta \vec{v}_1} f_2(\vec{v}_0 + \frac{1}{2} \frac{M}{m_2} \Delta \vec{v}_1 + \vec{u}) d^2u. \quad (\text{C.19})$$

On peut ainsi s'inspirer de la forme générale du terme de collision à grand angle (C.19) en vue d'écrire le terme source peuplant une composante suprathermique pour les particules initialement thermiques D et T, traduisant un mécanisme collisionnel à grand angle sur les particules α suprathermiques du type :

$$D + \alpha \rightarrow D^* + \alpha. \quad (\text{C.20})$$

Dans l'expression (C.19), le vecteur \vec{v}_0 correspond à l'origine du maillage en vitesse thermique, le vecteur $\Delta \vec{v}_1$ réfère au point de l'espace des vitesses suprathermiques où l'on désire évaluer le terme source correspondant à (C.20), et f_2 désigne la composante suprathermique de la fonction de distribution des particules α .

Ainsi, le terme source de (C.20) se ramène à un *moment particulier* de la composante suprathermique associée aux particules α , que l'on doit *a priori* évaluer en chaque maille de l'espace des vitesses suprathermiques. Le terme source (C.19) est en effet *anisotrope*. Il se révèle donc plus complexe que le terme source associé à la réaction de fusion peuplant la composante suprathermique des particules α suivant une coquille isotrope de l'espace des vitesses, de rayon 3.52 Mev.

Les composantes suprathermiques associées aux ions D et T évoluent ensuite selon les mêmes mécanismes que la composante suprathermique associée aux α (collisions sur les électrons et sur les espèces thermiques, transport et accélération due au champ électrique.)

L'architecture actuelle du code cinétique FUSE permet d'incorporer ce type de mécanisme collisionnel, chaque espèce ionique (D, T α) étant caractérisée par deux composantes en vitesse. Pour l'instant, seule la composante suprathermique associée aux particules α

est peuplée, mais on peut si on le souhaite peupler une composante suprathermique pour les ions D et T, moyennant l'implémentation du terme source anisotrope (C.19). Notons que le calcul numérique du terme source, bien que ne présentant pas de difficultés de principe, peut toutefois se révéler coûteux à évaluer en chaque maille de l'espace des vitesses suprathermiques, et ce, à chaque pas de temps et dans chaque cellule spatiale.

C.2 Traitement hybride fluide/cinétique des espèces ioniques

Une autre extension possible est de coupler la modélisation cinétique multi-échelle développée pour les particules α avec une modélisation fluide appliquée à des espèces ioniques éventuellement très collisionnelles. Ceci peut par exemple avoir un intérêt pour pouvoir étendre le domaine des simulations cinétiques appliquées au cas d'une cible FCI en incluant l'ablateur en CH, qui pourra être traité de manière cohérente avec le combustible DT dans une simulation cinétique.

Du fait de la petitesse des temps de collision associés à l'espèce C, une simulation cinétique ionique complète de la cible incluant l'ablateur et où chaque espèce ionique est modélisée au niveau cinétique (avec deux composantes pour les particules α) risque de se révéler très coûteuse voire hors de portée. Il faut alors avoir recours à un formalisme hybride où les espèces ioniques les plus collisionnelles sont représentées par une approche fluide, couplée à la modélisation cinétique des autres espèces ioniques. Les potentiels de Rosenbluth associés aux espèces ioniques traitées suivant un modèle fluide sont alors connus explicitement.

Dans le cas où une espèce α ²¹ est caractérisée par une distribution Maxwellienne :

$$f_\alpha = n_\alpha \left(\frac{m_\alpha}{2\pi T_\alpha} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{m_\alpha v^2}{2T_\alpha}},$$

on a les expressions suivantes des potentiels de Rosenbluth et de leurs dérivées :

$$S = 4\pi\Gamma_{\alpha\alpha}S_\alpha \quad \text{où} \quad \Delta_v S_\alpha = f_\alpha$$

soit encore

$$\Delta_u S = \frac{4}{\sqrt{\pi}}\Gamma_{\alpha\alpha} \left(\frac{m_\alpha}{2T_\alpha} \right)^{\frac{1}{2}} n_\alpha e^{-u^2} \quad \text{où} \quad u^2 = \frac{m_\alpha v^2}{2T_\alpha}.$$

21. Dans ce paragraphe, l'indice α désigne à une espèce thermique ionique donnée très collisionnelle, comme par exemple le carbone de l'ablateur. Cela ne fait pas référence aux produits de fusion.

On obtient :

$$\begin{aligned}
 \mathcal{S} &= -\frac{2\Gamma_{\alpha\alpha}n_{\alpha}}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{m_{\alpha}}{2T_{\alpha}}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\text{erf}(u)}{u} \\
 \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial v} &= \frac{2\Gamma_{\alpha\alpha}n_{\alpha}}{\sqrt{\pi}} \frac{m_{\alpha}}{2T_{\alpha}} \frac{1}{u} \left(\frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\text{erf}(u)}{u} - e^{-u^2} \right) \\
 \mathcal{T} &= -\frac{2\Gamma_{\alpha\alpha}n_{\alpha}}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{2T_{\alpha}}{m_{\alpha}}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{4} \left(e^{-u^2} + \left(2u + \frac{1}{u}\right) \frac{\sqrt{\pi}}{2} \text{erf}(u) \right) \\
 \frac{\partial^2 \mathcal{T}}{\partial v^2} &= -\frac{2\Gamma_{\alpha\alpha}n_{\alpha}}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{m_{\alpha}}{2T_{\alpha}}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{2u^2} \left(\frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\text{erf}(u)}{u} - e^{-u^2} \right)
 \end{aligned}$$

Ainsi, il n'y a plus nécessité de résoudre numériquement les équations de Poisson pour les espèces ioniques traitées au niveau fluide, et la simulation numérique des collisions se simplifie avantageusement. On économise également de la ressource mémoire en ne stockant que les profils spatiaux associés aux moyennes hydrodynamiques (densité, vitesse, température).

Ce type d'approche hybride peut permettre d'inclure plus d'espèces ioniques afin améliorer la représentativité des simulations cinétiques, sans pour autant générer des temps calculs prohibitifs.

Remarquons qu'un couplage hybride d'une nature semblable est d'ailleurs déjà mis en place dans le code pour simuler numériquement les interactions entre les électrons représentées par un modèle fluide et les ions traités en cinétique.

Bibliographie

- [1] S. Atzeni and J. Meyer-ter-Vehn. *The physics of inertial fusion*, Oxford University Press, 2004.
- [2] S. Atzeni, A. Caruso. An ignition criterion for isobarically compressed, inertially confined D-T plasmas. *Phys. Lett. A* 85 (1981) 345.
- [3] S. Atzeni, A. Caruso. Inertial confinement fusion : ignition of isobarically compressed D-T targets. *Nuovo Cimento* 80B (1984) 71.
- [4] R. Balescu. *Phys. Fluids* 3 (1960) 52.
- [5] M. Basko, J. Meyer-ter-Vehn. Asymptotic scaling laws for imploding thin fluid shells *Phys. Rev. Lett.* 88 (2002) 244502.
- [6] M. M. Basko. Model of diffusive energy transport by charged products of fusion reactions. *Soviet. J. Plasma. Phys.* 13 (1987) 558-61.
- [7] R. Betti, R. L. McCrory, C. P. Verdon. Stability analysis of unsteady ablation fronts. *Phys. Rev. Lett.* 71 (1993) 3131.
- [8] R. Betti, V. N. Goncharov, R. L. McCrory, C. P. Verdon. Growth rates of the ablative Rayleigh-Taylor instability in inertial confinement fusion. *Phys. Plasmas* 5 (1998) 1446.
- [9] R. Betti, K. Anderson, V. N. Goncharov, R. L. McCrory, D. D. Meyerhofer, S. Skupsky, R. P. J. Town. Deceleration phase of inertial confinement fusion implosions. *Phys. Plasmas* 9 (2002) 2277.
- [10] N. N. Bogoliubov. Kinetic Equations. *Journal of Experimental and Theoretical Physics (in Russian)* 16 (8) (1946) 691-702.
- [11] M. Born and H. S. Green. A General Kinetic Theory of Liquids I. The Molecular Distribution Functions. *Proc. Roy. Soc. A* 188 (1946) 10-18.
- [12] P. A. Bradley, D. C. Wilson, Two-dimensional capsule-hohlraum designs for the National Ignition Facility, *Phys. Plasmas* 8 (2001) 3724 and references therein.
- [13] S. I. Braginskii, Transport Processes in a Plasma, *Reviews of Plasma Physics*, V. 1, M. A. Leontovich ed. Consultants Bureau, New York, 1965, p. 205.
- [14] H. Brysk, Electron-ion equilibration in a partially degenerate plasma, *Plasma Physics* 16 (1974) 927.
- [15] H. Brysk, P. M. Campbell, P. Hammerling, Thermal conduction in laser fusion, *Plasma Physics* 17 (1975) 473.

- [16] E. Buresi, J. Coutant, R. Dautray, M. Decroisette, B. Duborgel, P. Guillauneux, J. Launspach, P. Nelson, C. Patou, J.-M. Risse, and J.-P. Watteau. *Laser Part. Beams*, 4 531 (1986).
- [17] C. Buet, S. Cordier, P. Degond, M. Lemou. Fast algorithms for numerical, conservative, and entropy approximations of the Fokker-Planck-Landau equation. *J. Comput. Phys.* 133 (1997) 310-322
- [18] M. Casanova, O. Larroche, J.-P. Matte. Kinetic study of a shock wave in a high-temperature plasma. *Phys. Rev. Lett.* 67 (1991) 2143.
- [19] J. S. Chang, G. Cooper. A practical difference scheme for Fokker-Planck equations *J. Comput. Phys.* 6 (1970) 1.
- [20] F. Chaland, R. Sentis. Two-temperature Euler equations for a plasma with slowing down of suprathermal particles. *Int. Numer. Meth. Fluids* 56 (2008) 1489.
- [21] C. Chenais-Popovics *et al.*, Kinetic to thermal energy transfer and interpenetration in the collision of laser-produced plasmas, *Phys. Plasmas* 4 (1997) 190.
- [22] E. G. Corman, W. E. Loewe, G. E. Cooper, A. M. Winslow. Multi-group diffusion of energetic charged particles. *Nucl. Fusion* 15 (1975) 377.
- [23] C. de Boor. A practical guide to splines, Springer-Verlag, New York, (1978)
- [24] P. Degond, B. Lucquin-Desreux. Comportement hydrodynamique d'un mélange gazeux formé de deux espèces de masse très différentes. *C. R. Acad. Sci. Paris* 322 (1996) 405.
- [25] P. Degond, B. Lucquin-Desreux. An entropy scheme for the Fokker-Planck collision operator of plasma kinetic theory. *Numer. Math.* 68(2) (1994) 239.
- [26] Y.N. Dnestrovskii, D. P. Kostomarov, Numerical simulation of plasmas, Chapter 2 p55, Springer 1985.
- [27] G. S. Fraley, E. J. Linnebur, R. J. Mason, R. L. Morse. Thermonuclear burn characteristics of compressed deuterium-tritium microspheres, *Phys. Fluids* 17 (1974) 474.
- [28] F. N. Fritsch, R. E. Carlson, Monotone Piecewise Cubic Interpolation, *SIAM J. Numer. Anal.* 17 (1980) 238.
- [29] E. G. Gamaly. Hydrodynamic instability of target implosion in ICF. *Nuclear fusion by inertial confinement – A comprehensive treatise*, G. Velarde, Y. Ronen, J. M. Martinez-Val (CRC Press, Boca Raton, Florida, 1993).
- [30] J. Garnier, G. Malinié, Y. Saillard, C. Cherfils-Clérouin. Self-similar solutions for a nonlinear radiation diffusion equation. *Phys. Plasmas* 13 (2006) 092703.
- [31] J. Garnier, C. Cherfils-Clérouin. The role of nuclear reactions and alpha-particle transport in the dynamics of inertial confinement fusion capsules. *Phys. Plasmas* 15 (2008) 102702.
- [32] S. H. Glenzer et al. Demonstration of Ignition Radiation Temperatures in Indirect-Drive Inertial Confinement Fusion Hohlraums. *Phys. Rev. Lett.* 106 (2011) 085004.
- [33] V. N. Goncharov. Theory of the ablative Richtmyer-Meshkov instability. *Phys. Rev. Lett.* 82 (1999) 2091.

-
- [34] S. Yu. Gus'kov, O. N. Krokhin, V. B. Rozanov. Transport of energy by charged particles in a laser plasma. *Soviet. J. Quantum. Electr.* 4 (1974) 895-8.
 - [35] S. Yu. Gus'kov, O. N. Krokhin, V. B. Rozanov. Similarity solution of thermonuclear burn wave with electron and α -conductivities. *Nucl. Fusion* 16 (1976) 957.
 - [36] P. A. Haldy, J. Ligou. A moment method for calculating the transport of energetic charged particles in hot plasmas. *Nucl. Fusion* 17 (1977) 6.
 - [37] J. H. Hammer, M. D. Rosen. A consistent approach to solving the radiation diffusion equation. *Phys. Plasmas* 10 (2003) 1829.
 - [38] M. C. Herrmann, M. Tabak, J. D. Lindl. A generalized scaling law for the ignition energy of inertial confinement fusion capsules. *Nucl. Fusion* 41 (2001) 99-111.
 - [39] R. W. Hockney. *The Potential Calculation and Some Applications*. Methods in Computational Physics Vol. 9, ed. by B. Alder, A. Fernbach, M. Rotenberg (Academic Press, New York, 1970), p. 135.
 - [40] J. J. Honrubia. Charged particle transport in ICF targets. *Nuclear fusion by inertial confinement – A comprehensive treatise*, G. Velarde, Y. Ronen, J. M. Martinez-Val (CRC Press, Boca Raton, Florida, 1993), chapter 9, p. 211.
 - [41] A. Kemp, J. Meyer-ter-Vehn, S. Atzeni. Stagnation pressure of imploding shells and ignition energy scaling of inertial confinement fusion targets *Phys. Rev. Lett.* 86 (2001) 3336-9. V
 - [42] R. E. Kidder. Theory of homogeneous isentropic compression and its application to laser fusion *Nucl. Fusion* 14 (1974) 53.
 - [43] R. E. Kidder. Energy gain of laser-compressed pellets : a simple model calculation. *Nucl. Fusion* 16 (1976) 405.
 - [44] J. Killeen, K. D. Marx. The solution of the Fokker-Planck equation for a mirror-confined plasma. *Meth. Comput. Phys.* 9 (1970) 422.
 - [45] John G. Kirkwood. The Statistical Mechanical Theory of Transport Processes I. General Theory. *Journal of Chemical Physics* 14 (3) (1946) p. 180.
 - [46] John G. Kirkwood. The Statistical Mechanical Theory of Transport Processes II. Transport in gases. *Journal of Chemical Physics* 15 (1) (1947) p. 72.
 - [47] N. A. Krall, A. W. Trivelpiece. *Principles of Plasma Physics*, San Francisco Press (1986).
 - [48] L. D. Landau. *Phys. Z. Sowjetunion* 10 (1936) 154.
 - [49] B. Lapeyre, E. Pardoux, R. Sentis. *Monte Carlo methods of transport and diffusion equations*, Oxford University Press, 2003.
 - [50] O. Larroche, Kinetic simulation of a plasma collision experiment, *Phys. Fluids B* 5, 8 (1993) 2816.
 - [51] O. Larroche. Kinetic simulations of fuel ion transport in ICF target implosions. *Eur. Phys. J. D* 27 (2003) 131.
 - [52] O. Larroche, An efficient explicit numerical scheme for diffusion-type equations with a highly inhomogeneous and highly anisotropic diffusion tensor, *J. Comput. Phys.* 223 (2007) 436.

- [53] Y. T. Lee, R. M. More, An electron conductivity model for dense plasmas, *Phys. Fluids. Anal* 27 (1984) 1273.
- [54] M. Lemou. Multipole expansions for the Fokker-Planck-Landau operator. *Numerische Mathematik* 78 (1998) 597-618
- [55] A.Lenard. *Ann. Phys. (New York)* 10 (1960) 390.
- [56] C. K. Li, R. D. Petrasso, Fokker-Planck equation for moderately coupled plasmas, *Phys. Rev. Lett.* 70 (1993) 3059.
- [57] J.C Whitney. Finite difference methods for the Fokker-Planck equation. *J. Comput. Phys.* 6(3) (1970) 483.
- [58] J. D. Lindl. Development of the indirect-drive approach to inertial confinement fusion and the target physics basis for ignition and gain. *Phys. Plasmas* 2 (1995) 3933.
- [59] J. D. Lindl. Inertial Confinement Fusion – The quest for ignition and energy gain using indirect drive, Springer Verlag, New York, 1998.
- [60] J. Lindl, O. Landen, J. Edwards, E. Moses and NIC team, Review of the National Ignition Campaign 2009-2012, *Phys. Plasmas* 21 (2014) 020501.
- [61] R. L. McCrory, J. M. Soures, C. P. Verdon, F. J. Marshall, S. A. Letzring, T. J. Kessler, J. P. Knauer, H. Kim, R. L. Kremens, S. Skupsky, R. L. Keck, D. K. Bradley, W. D. Seka, P. A. Jaanimagi, J. A. Delettrez, P. W. McKenty. High-intensity, direct-drive implosion experiments. *Laser and Part. Beams* 8 (1990) 27.
- [62] W. Manheimer, D. Colombant, Effects of viscosity in modeling laser fusion implosions, *Laser and Particle Beams* 25 (2007) 541-547.
- [63] R. E. Marshak. Effect of radiation on shock wave behavior. *Phys. Fluids* 1 (1958) 24.
- [64] G. I. Marchuk. *Methods of Numerical Mathematics*, Springer-Verlag, New York (1982).
- [65] T. A. Mehlhorn, J. J. Duderstadt. A discrete ordinates solution of the Fokker-Planck equation characterizing charged particle transport. *J. Comput. Phys.* 38 (1980) 1.
- [66] K. Molvig et al. Knudsen Layer Reduction of Fusion Reactivity. *Phys. Rev. Lett.* 109 (2012) 095001.
- [67] M. Murakami, K. Nishihara, H. Takabe. Theory of efficient shell implosions. *Laser and Part. Beams* 7 (1989) 189.
- [68] J. Nuckolls, L. Wood, A. Thiessen, G. Zimmerman. Laser compression of matter to super-high densities : Thermonuclear (CTR) applications. *Nature* 239 (1972) 139.
- [69] A. M. Oparin, S. I. Anisimov, J. Meyer-ter-Vehn. Kinetic simulation of DT ignition and burn in ICF targets. *Nucl. Fus.* 36 (1996) 443.
- [70] G. C. Pomraning. Flux-limited diffusion and Fokker-Planck equations. *Nucl. Sci. Eng.* 85 (1983) 116.
- [71] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling and B. P. Flannery, Numerical recipes in C, Cambridge University Press, Cambridge, 1992.

-
- [72] J.M. Rax, *Physique des Plasmas*, Chapter 12 and references therein, Dunod, 2008.
 - [73] H. G. Rinderknecht et al. Ion thermal decoupling and species separation in shock-driven Implosions. soumis à *Phys. Rev.Lett.* (2014).
 - [74] M. J. Rosenberg et al. Exploration of the Transition from the hydrodynamic-like to the strongly Kinetic Regime in shock-driven Implosions. *Phys. Rev. Lett.* 112 (2014) 185001.
 - [75] M. N. Rosenbluth, W. M. MacDonald, D. L. Judd. Fokker-Planck equation for an inverse-square force. *Phys. Rev.* 107 (1957) 1.
 - [76] Y. Saillard, Hydrodynamique de l'implosion d'une cible FCI, *C. R. Acad. Sci. Paris t. 1 sér. IV* (2000) 705.
 - [77] A. G. R. Thomas, M. Tzoufras, A. P. L. Robinson, R. J. Kingham, C. P. Ridgers, M. Sherlock, A. R. Bell. A Review of Vlasov-Fokker-Planck Numerical Modeling of Inertial Confinement Fusion Plasma. *J. Comput. Phys.* 231 (2012) 1051-1079.
 - [78] I. P. Shkarovsky, T. W. Johnston, M. P. Bachynski. *The Particle Kinetics of Plasmas*, Addison-Wesley (1966).
 - [79] L. Spitzer, R. Härm, Transport phenomena in a completely ionized gas, *Phys. Rev.* 89 (1953) 977.
 - [80] F. Vidal, J.-P. Matte, M. Casanova, O. Larroche. Spherical ion kinetic simulations of DT implosions. *Phys. Rev. E* 52 (1995) 4568.
 - [81] J. Yvon. *La théorie statistique des fluides et l'équation d'état* (1935) Paris, Hermann.

Résumé

Les résultats établis durant ce travail de thèse concernent la résolution de problèmes multi-échelles, pour lesquels nous mettons en place - en les justifiant aussi rigoureusement que possible - des techniques de résolution en vue de répondre à une problématique physique particulière.

Le premier problème multi-échelle traité est celui de la diffusion de la chaleur dans un milieu fissuré, où coexistent deux échelles spatiales. Les fissures correspondent à des hétérogénéités décrites à l'échelle microscopique et on cherche à modéliser leur effet sur la propagation de la chaleur observée à l'échelle du milieu macroscopique. L'agencement des fissures est supposé périodique. En effectuant un développement asymptotique du modèle exact par rapport à un petit paramètre ε correspondant au rapport des deux échelles spatiales, on établit la formulation du modèle homogénéisé. Nous montrons en particulier que l'effet des fissures peut être modélisé par un terme source volumique dans l'équation de la chaleur homogénéisée. Suivant la forme des fissures considérées, la formulation du modèle homogénéisé peut également nécessiter d'introduire des conditions de transmission liées à l'existence d'une couche limite à l'interface connectant la partie fissurée et la zone intègre du milieu considéré. En suivant une approche par point fixe, on montre que le modèle homogénéisé est bien posé et on donne une méthode de construction de la solution homogénéisée. Le processus d'homogénéisation ainsi décrit fournit une approche générale qui peut être couplée à un code de calcul aux Eléments Finis afin de simuler un phénomène diffusif dans un milieu fissuré, en particulier dans le cas où la taille des fissures est trop petite pour pouvoir mener un calcul direct. L'intérêt de la méthode est d'ailleurs illustrée sur différentes configurations de milieux fissurés. Une preuve de convergence du modèle exact vers le modèle homogénéisé est ensuite exposée en détail. Des extensions à des configurations de milieux fissurés plus complexes (largeur de fissures aléatoires, régime de diffusion non-linéaire) sont finalement évoquées.

Le second problème multi-échelle abordé traite des plasmas de fusion étudiés dans le contexte de la Fusion par Confinement Inertiel (FCI). On établit une modélisation détaillée au niveau cinétique du processus de combustion de l'hydrogène (initialement sous la forme d'une capsule sphérique cryogénique formée de deutérium D et de tritium T) réagissant suivant la réaction de fusion $D + T \rightarrow \alpha + n + 17.56 \text{ MeV}$. L'aspect multi-échelle du problème est ici lié à la co-existence de deux échelles d'énergie nécessaires pour décrire les populations ioniques à traiter : les ions dits thermiques D,T, sont caractérisés par une énergie de l'ordre du keV tandis que les particules α suprathermiques, créées à 3.52 MeV par la réaction de fusion évoluent sur une gamme d'énergie beaucoup plus étendue. Une analyse du processus de ralentissement des particules suprathermiques modélisé par l'opérateur de Fokker-Planck conduit à l'élaboration d'un formalisme bimodal où la fonction de distribution des particules α est décrite par deux composantes : une composante suprathermique, qui évolue lentement sur un domaine très étendu de l'espace des vitesses, est couplée à une composante thermique caractérisée par un support en vi-

tesse localisé autour du domaine des vitesses thermiques. On montre que l'opérateur de Fokker-Planck peut être scindé en un système de deux équations couplées régissant respectivement chaque composante (thermique/suprathermique) de la fonction de distribution des particules α . Ce formalisme permet en particulier de modéliser au niveau cinétique les processus de création, transport, accélération, ralentissement et thermalisation des produits de fusion, et ce, de manière cohérente avec une modélisation cinétique des espèces thermiques (ions D,T). Sur la base de cette décomposition en deux échelles de variation, on construit et on optimise différents algorithmes visant à résoudre numériquement le modèle cinétique multi-espèce complet prenant en compte les particules α produites par réactions de fusion. Le caractère bimodal de la distribution se traduit en particulier par la co-existence de deux maillages en vitesse, chacun étant adapté à l'échelle de variation à traiter. Le couplage numérique entre les deux maillages est déduit naturellement du formalisme multi-échelle. Cette approche nous permet de résoudre l'ensemble du système cinétique en des temps calculs qui restent raisonnables. Une fois validées sur des cas tests pertinents pour la FCI, les méthodes numériques multi-échelles mises au point sont appliquées à des configurations réalistes de cibles FCI. Elles mettent alors en évidence des effets cinétiques importants sur la formation et la structure de la flamme de combustion se propageant dans le combustible.

En outre, une analyse par développement asymptotique nous permet de retrouver la technique de couplage entre les deux échelles de vitesse caractérisant la fonction de distribution des particules α et de tisser un lien avec le traitement de l'aspect multi-échelle du premier problème de diffusion en milieux fissurés. Cela nous permet de conclure sur une certaine unité dans la résolution des couplages multi-échelles considérés, avant d'ouvrir sur les extensions possibles des diverses méthodes mises au point dans chacun des problèmes traités.

Mots-clés: multi-échelle, homogénéisation, diffusion, cinétique, Fokker-Planck, combustion, FCI.

Abstract

The results established in this thesis deal with some multi-scale problems for which we design specially tailored techniques in order to tackle a specific physical problem, in which the multi-scale aspect plays a crucial role. We also try to justify, as rigorously as possible, the different methods we propose.

The first considered multi-scale problem deals with the heat equation inside a cracked medium. In this problem, the cracks are described at a microscopic scale. Our goal is to model the propagation of heat in the whole domain, observed at the macroscopic scale. The crack medium setting is supposed to be periodic. Based on an asymptotic expansion of the exact model with respect to a small parameter ε corresponding to the period of the cracked medium, we derive the homogenized model. In particular, we show that the crack effects can be modeled by a volume source term in the homogenized heat equation. Depending on the shape of the cracks, a boundary layer may exist at the vicinity of the crack surface. To treat the boundary layer, transmission conditions need to be

introduced in the the homogenized model. Following a fixed point approach, we show that the homogenized model is well-posed and we give a practical method to build the homogenized solution. The homogenization approach gives a general method that can be used in standard Finite Element Method codes to simulate a diffusion process in a cracked medium, in particular when the crack size becomes too small to be modeled directly. The homogenization method is illustrated on a couple of numerical examples, where different configurations of cracked medium are considered. A rigorous proof of convergence is also exposed in detail. Extensions to more intricate cracked medium configurations, such as random cracked media, or non-linear behavior laws, are discussed.

The second multi-scale problem we treat in detail is related to the modeling of fusion plasma, in the Inertial Confinement Fusion (ICF) context. We derive an accurate kinetic modeling of the combustion process of hydrogen, which is initially in the form of a cryogenic deuterium (D) and tritium (T) capsule. The two hydrogen isotopes fuse according to the nuclear reaction $D + T \rightarrow \alpha + n + 17.56 \text{ MeV}$. The multi-scale aspect of the problem comes from the coexistence of two energy scales that are required to describe the different ion populations : D,T thermal ions are characterized by an energy scale in the keV range, while suprathermal fusion products, such are α -particles, evolve on a MeV energy scale. A physical analysis of the slowing down process modeled by a Fokker-Planck model leads to a two-component description of the α distribution function. A suprathermal component which evolves slowly on a wide velocity domain is coupled to a thermal component characterized by a localized support on the thermal velocity domain. More specifically, we show that the Fokker-Planck operator can be split into a two coupled equation system governing each of the thermal/suprathermal component of the α distribution function. This multi-scale technique enables us to model kinetically the creation, transport and collisional relaxation of the suprathermal α -particles. The thermalization process is also rigorously modeled, in a consistent way with the kinetic model of the thermal plasma bulk. Based on this two-component approach, many numerical algorithms are designed to solve the whole kinetic model taking fusion products into account in a tractable way. In particular, the two-component nature of the α distribution function leads to the coexistence of two velocity grids. Each grid is specially designed to treat a given energy scale, namely the thermal or suprathermal scale. A numerical coupling method links the two velocity grids. The coupling strategy is naturally deduced from the underlying Fokker-Planck model. This approach enables us to tackle real ICF configurations in non-prohibitive computational times. The different numerical methods are first validated against known analytical results. Then, we use them to study in detail the potential role of kinetic effects in the implosion and combustion stages of realistic DT capsules. We show significant consequences on the flame structure during the combustion process.

Besides, an asymptotic expansion based analysis is performed to justify more rigorously the multi-scale technique developed to solve the coupling between the two energy scales of the problem. By the way, this enables us to build a link with the first part of the manuscript. We show some unity can be drawn from the two considered problems, giving a kind of general framework to tackle multi-scale problems.

Keywords: multi-scale, homogenization, diffusion, kinetic, Fokker-Planck, combustion, ICF.

